

Herstellung und Charakterisierung hocheffizienter, mikromechanischer NIR-Beugungsgitter für den Einsatz in miniaturisierten Spektrometern

Von der Fakultät für Mathematik, Naturwissenschaften und Informatik
der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
(Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Diplom-Ingenieur

Fabian Zimmer

Geboren am 03.02.1976 in Lörrach

Gutachter: PD Dr. habil. Harald Schenk

Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. habil. Dieter Schmeißer

Gutachter: Prof. Dr. Martin Hoffmann

Tag der mündlichen Prüfung: 23. April 2012

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer Institut für Photonische Mikrosysteme in Dresden. In diesem Zusammenhang gilt mein besonderer Dank Dr. Harald Schenk, der als stellvertretender Institutsleiter diese Arbeit unterstützte und förderte und sich zur wissenschaftlichen Betreuung bereit erklärte.

Des Weiteren gilt mein Dank Herrn Dr. Thilo Sandner, der diese Arbeit durch vielfältige Anregungen und Ratschläge begleitete, die wesentlich zu ihrer Entstehung beigetragen haben. Zugleich möchte ich mich bei den Projektteilnehmern Andreas Heberer und Dr. Andreas Kenda (Carinthisan Tech Research) für die stets konstruktiven Diskussionen bedanken, die den Fortschritt der Arbeit begünstigt haben.

Ebenso möchte ich mich bei den Ingenieuren der Prozesslinie bedanken, die aufgrund ihrer Erfahrung maßgeblichen Anteil an der erfolgreichen Herstellung der mikromechanischen Beugungsgitter gehabt haben. Es sei auch den vielen Mitarbeitern gedankt, die mich bei Untersuchungen und mit Diskussionen unterstützt haben und somit Anteil am Gelingen dieser Arbeit haben.

Außerdem gilt mein Dank meinen Eltern sowie meiner Lebensgefährtin für Ihre Geduld, Verständnis und Unterstützung, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Fabian Zimmer

Dresden, 15.11.2011

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	v
Abbildungsverzeichnis	vii
Formelverzeichnis	ix
Abkürzungsverzeichnis	xiii
1 Einleitung / Zielsetzung der Arbeit	1
2 Stand der Technik	5
2.1 Messmethodik und Anwendungsgebiete der NIR-Spektroskopie	5
2.2 NIR-Spektrometer	8
2.3 Festlegung der Entwicklungsparameter	12
3 Theoretische Grundlagen	15
3.1 Beugung am Reflexionsgitter	15
3.2 Monochromator mit Czerny-Turner-Konfiguration	18
3.3 Kristallografische Eigenschaften von Silizium	21
4 Design und Dimensionierung	25
4.1 Dimensionierung des mikromechanischen Aktuators	25
4.2 Dimensionierung des Beugungsgitters	31
4.3 Spektrometerdesign	37
4.4 Signalverarbeitung zur Spektrenberechnung	41
5 Technologieentwicklung hocheffizienter mikromechanischer Beugungsgitter	49
5.1 Evaluation geeigneter Technologien der Gitterherstellung	49
5.2 Simulation der spektralen Beugungseffizienz des Gitters	53
5.2.1 Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen	55
5.2.2 Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen	60
5.2.3 Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen	65
5.2.4 Zusammenfassung der Simulationsergebnisse	69
5.3 Analyse des Herstellungsverfahrens für mikromechanische Beugungsgitter	71
5.3.1 Herstellung trapezförmiger Gitterstrukturen	71
5.3.2 Herstellung sinusförmiger Gitterstrukturen	73
5.3.3 Herstellung von geblazten Gitterstrukturen	78
5.3.4 Entwicklung spezieller Kontrollstrukturen zur Prozessüberwachung	79
5.3.5 Eigenschaften der Aluminium-Verspiegelungsschicht	82

5.3.6	Herstellungsprozess mikromechanischer Beugungsgitter	83
6	Charakterisierung	87
6.1	Optische Analyse der mikromechanischen Beugungsgitter	87
6.1.1	Spektrale Beugungseffizienz	87
6.1.2	Planarität der Gitterspiegelplatte	93
6.2	Mechanische Analyse der mikromechanischen Beugungsgitter	96
6.2.1	Antriebsspannung, Schwingungsamplitude, Frequenz	96
6.2.2	Analyse der mikromechanischen Schwingung	98
6.2.3	Stabilitätsspannung	100
6.2.4	Mechanische Schockbelastung	102
7	Integration des mikromechanischen Beugungsgitters in das NIR-Spektrometer	105
7.1	Aufbau des NIR-Mikrospektrometers	105
7.2	Nachweis der Leistungsfähigkeit und spektrale Analyse	107
8	Zusammenfassung und Ausblick	111
9	Anhang	123
9.1	Absorptionsbanden im NIR-Bereich	123
9.2	Herleitung der Beugungsbedingung für die Czerny-Turner- Konfiguration	124
9.3	Intensitätsverteilung am Beispiel eines Doppelspalts	125
9.4	Herleitung der Fokuslänge für parabolische Off-Axis-Spiegel	126
9.5	Herleitung der Amplitudenberechnung des mikromechanischen Beugungsgitters	128

Tabellenverzeichnis

2.1	Absorptionswellenlänge und Vibrationsbanden am Beispiel von H_2O	6
2.2	Anwendungen und Einsatzbereiche der NIR-Spektroskopie	7
2.3	Übersicht von NIR-Spektrometern mit einer Leistungsfähigkeit dem Stand der Technik entsprechend	11
2.4	Zielspezifikationen für das miniaturisierte NIR-Spektrometer	13
3.1	Eigenschaften von einkristallinem Silizium	22
4.1	Designparameter optimierter, mikromechanischer Beugungsgitter mit Balkenfeder	30
4.2	Berechnete Gitterparameter für ausgewählte Gitterkonstanten	36
4.3	Zusammenfassung der hergeleiteten Parameter für ein optimiertes Spektrometerdesign mit integriertem mikromechanischem Beugungsgitter	40
4.4	Zusammengefasste Parameter der Signalverarbeitung zur Spektrenberechnung . .	47
5.1	Berechnete Grenzwellenlänge für unterschiedliche Beugungsordnungen	54
5.2	Simulierte mittlere Beugungseffizienz der optimierten Gitterstrukturen	70
9.1	NIR-Absorptionsbanden ausgewählter Moleküle	123

Abbildungsverzeichnis

2.1	Schwingungsmoden von Molekülen im Infrarot-Bereich	5
2.2	Spektrograf mit Czerny-Turner-Konfiguration	8
2.3	Spektrograf mit Rowland-Konfiguration	9
2.4	Monochromator mit angepasster Fastie-Ebert-Konfiguration	10
3.1	Beugung am Reflexionsgitter	16
3.2	Winkel- und Lineardispersion	17
3.3	Parameter eines Czerny-Turner-Monochromators mit mikromechanischem Beugungsgitter	19
3.4	Bild des Eingangsspalts und Intensitätsverteilung am Ausgangsspalt	20
3.5	Bedeutende Kristallebenen im Siliziumeinkristall	21
4.1	Aufbau des mikromechanischen Beugungsgitters	26
4.2	Schwingungsverlauf des resonant betriebenen mikromechanischen Beugungsgitters	28
4.3	Simulation der mechanischen Scherspannung für eine Balkenfeder	29
4.4	Winkel- und Lineardispersion für ausgewählte Gitterkonstanten	33
4.5	Änderung des Ausfallswinkels pro Wellenlänge $\Delta\beta/\Delta\lambda$ und Werte des Ausfallswinkel β in Abhängigkeit der Wellenlänge	34
4.6	Änderung der effektiven Gitterfläche bei Drehung der Gitterspiegelplatte	35
4.7	Änderung der gemessenen Wellenlänge hervorgerufen durch periodische Abweichungen der Gitterkonstante	35
4.8	Strahlengang des Parabolspiegels $P1$	38
4.9	Berechnete, spektrale Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers (Bandpass)	39
4.10	Messanordnung zur Bestimmung der Schwingungsfrequenz f_{mB} und zur Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0	42
4.11	Parameter für die zeitabhängige Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0 des mikromechanischen Beugungsgitters	43
4.12	Wellenlängendifferenz $\Delta\lambda$ zwischen zwei Messzeitpunkten bei konstantem Messzeitintervall t_{mI}	45
5.1	Spezifische Parameter für das Herstellungsverfahren von Gitterstrukturen mittels TMAH	52
5.2	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Einfluss auf die spektrale Beugungseffizienz bei Variation der Stegbreite s	56
5.3	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Spektrale Beugungseffizienz der TE- und TM-Polarisation der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s	57

5.4	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Einfluss bei Verschwinden der -1. bzw. +2. Beugungsordnung	57
5.5	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Einfluss auf die spektrale Beugungseffizienz bei Variation der Stegbreite s	58
5.6	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Spektrale Beugungseffizienz der TE- und TM-Polarisation der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s	58
5.7	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Einfluss bei Verschwinden der -1. bzw. +2. Beugungsordnung	59
5.8	Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen - Einfluss der Gitterkonstante g bei festem Verhältnis von Stegbreite zu Gitterkonstante s/g	59
5.9	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Einfluss auf die spektrale Beugungseffizienz bei Variation des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g	60
5.10	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Spektrale Beugungseffizienz der TE- und TM-Polarisation der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g	61
5.11	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Einfluss bei Verschwinden der -1. bzw. +2. Beugungsordnung	61
5.12	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Einfluss auf die spektrale Beugungseffizienz bei Variation des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g	62
5.13	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Spektrale Beugungseffizienz der TE- und TM-Polarisation der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g	63
5.14	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Einfluss bei Verschwinden der -1. bzw. +2. Beugungsordnung	63
5.15	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen - Einfluss der Gitterkonstante g bei festem Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g	64
5.16	Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen - Einfluss von Abweichungen zur idealen Sinusform bei festem Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g	65
5.17	Geblazte Beugungsgitter in Littrow-Konfiguration	66
5.18	Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Einfluss auf die spektrale Beugungseffizienz bei Variation der Stegbreite s	66
5.19	Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Spektrale Beugungseffizienz der TE- und TM-Polarisation der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s	67
5.20	Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen ($g = 1600\text{nm}$) - Einfluss bei Verschwinden der -1. bzw. +2. Beugungsordnung	67
5.21	Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Einfluss auf die spektrale Beugungseffizienz bei Variation der Stegbreite s	68
5.22	Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Spektrale Beugungseffizienz der TE- und TM-Polarisation der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s	68
5.23	Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen ($g = 2500\text{nm}$) - Einfluss bei Verschwinden der -1. bzw. +2. Beugungsordnung	69

5.24	REM-Aufnahme von trapezförmigen Beugungsgittern	72
5.25	Signifikante Parameter zur Ausbildung sinusförmiger Gitterstrukturen basierend auf trapezförmigen Grundstrukturen	74
5.26	REM-Aufnahme einer BPSG-Schicht, hergestellt durch einen konformen PE-CVD-Prozess	75
5.27	Formeigenschaften von getemperten BPSG in Abhängigkeit der Grubengröße	76
5.28	Sinusförmige Verrundung von BPSG in Abhängigkeit der Anfangsschichtdicke mit 300 nm und 350 nm	77
5.29	Sinusförmige Verrundung von BPSG in Abhängigkeit der Anfangsschichtdicke mit 400 nm und 500 nm	77
5.30	REM-Aufnahme einer hergestellten, geblazten Gitterstruktur	79
5.31	Entwickelte Kontrollstruktur zur mikroskopischen Überwachung der anisotropen Ätztiefe durch nasschemisches Ätzen mittels TMAH	80
5.32	Funktionsweise der Kontrollstruktur zur Erreichung einer Stegbreite s durch mikroskopische Überwachung der lateralen Unterätzung	81
5.33	Funktionsnachweis der Kontrollstruktur zur mikroskopischen Überwachung der lateralen Unterätzung	81
5.34	Simulierte Reflektivität der Aluminium-Verspiegelungsschicht in Abhängigkeit der Wellenlänge, des Einfallswinkels und der Schichtdicke	82
5.35	Prozessablauf zur Herstellung mikromechanischer Beugungsgitter	84
5.36	Mikroskopische Aufnahme eines gefertigten mikromechanischen Beugungsgitters	86
6.1	Messaufbau zur Bestimmung der spektralen Beugungseffizienz von hergestellten Gitterstrukturen	88
6.2	Optoelektrische Funktionsskizze zur Bestimmung der spektralen Beugungseffizienz von hergestellten Gitterstrukturen	89
6.3	Vergleich von simulierter und gemessener spektraler Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung von trapezförmigen Gitterstrukturen in Abhängigkeit der Wellenlänge	90
6.4	Vergleich von simulierter und gemessener spektraler Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung von sinusförmigen Gitterstrukturen	92
6.5	Vergleich von simulierter und gemessener spektraler Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung von geblazten Gitterstrukturen	93
6.6	Krümmungsmessung eines mikromechanischen Referenzspiegels ohne Gitterstrukturierung mittels Weißlichtinterferometrie	94
6.7	Krümmungsmessung der Gitterspiegelplatte mit trapezförmiger Gitterstruktur mittels Weißlichtinterferometrie	94
6.8	Krümmungsmessung der Gitterspiegelplatte mit sinusförmiger Gitterstruktur mittels Weißlichtinterferometrie	95
6.9	Messaufbau zur Bestimmung der Schwingungsamplitude Ω_0 und der Schwingungsfrequenz f_{mB} des mikromechanischen Beugungsgitters	96
6.10	Messung der Frequenz-Amplituden-Kennlinie eines mikromechanischer Beugungsgitter	97
6.11	Messung der Spannungs-Amplituden- und der Spannungs-Frequenz-Kennlinie von mikromechanischen Beugungsgittern	98

6.12	Abweichung von gemessener Schwingung des mikromechanischen Beugungsgitter zu einem idealen Sinusverlauf unter Verwendung der Cubic Spline Interpolation .	99
6.13	Einfluss auf die Bestimmung der gemessenen Wellenlänge durch die Abweichung der realen Schwingung von einem idealen Sinusverlauf	99
6.14	Messung der maximalen Stabilitätsspannung U_S der mikromechanischen Beugungsgitter	101
6.15	Bestimmung der Schockfestigkeit mikromechanischer Beugungsgitter in x-, y- und z-Richtung	102
7.1	Technische Umsetzung des miniaturisierten NIR-Spektrometers in Kooperation mit Carinthion Tech Research (CTR) [89]	105
7.2	Elektrisches Blockschaltbild des miniaturisierten NIR-Spektrometers	106
7.3	Spektrale Messung einer schmalbandigen Laserquelle zur Ermittlung der spektralen Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers	107
7.4	Nachweis der spektralen Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers mittels seltener Erden	109
9.1	Winkelabhängige Intensitätsverteilung am Beispiel eines homogen ausgeleuchteten Doppelspalts	125
9.2	Prinzipiskizze eines Off-Axis-Parabolspiegels zur Herleitung der Dimensionierung	126

Formelverzeichnis

a	Breite der Gitterspiegelplatte.
a_{eff}	Effektive Breite der Gitterspiegelplatte.
α	Einfallswinkel, gemessen zur Gitternormalen.
α_0	Mittlerer Einfallswinkel, definiert als arithmetisches Mittel des minimalen und maximalen Einfallswinkels.
α_b	Steigungswinkel eines geblazten Beugungsgitters, auch Blazewinkel genannt.
α_g	Einfallswinkel der Grenzwellenlänge λ_g , bei der der Ausfallswinkel β genau 90° beträgt und die gebeugte Wellenlänge somit gerade noch propagiert.
α_{max}	Maximaler Einfallswinkel, benötigt für die größte Wellenlänge eines gewählten Wellenlängenbereichs.
α_{min}	Minimaler Einfallswinkel, benötigt für die kleinste Wellenlänge eines gewählten Wellenlängenbereichs.
b	Grubenbreite der Gitterstrukturen.
B	Beleuchtungsstärke der Lichtquelle.
b_f	Breite der Torsionsfeder.
BP	Bandpass des NIR-Spektrometers.
β	Ausfallswinkel gebeugten Lichts, gemessen zur Gitternormalen.
C	Kondensatorkapazität.
C_t	Torsionsfestigkeit des mikromechanischen Beugungsgitters.
c_o	Breite der oberen Halbwelle einer sinusförmigen Gitterstruktur.
c_u	Breite der unteren Halbwelle einer sinusförmigen Gitterstruktur.
d_p	Durchmesser des durch Parabolspiegel $P1$ kollimierten Lichtstrahls.
d_S	Schichtdicke.
δ	Dämpfungskonstante.
E	Elastizitätsmodul, Energie.
ϵ_0	Elektrizitätskonstante.
f_0	Eigenfrequenz.
$f_{Ab,min}$	Minimale Abtastfrequenz.
f_{anr}	Anregungsfrequenz.
f_{mB}	Schwingungsfrequenz des mikromechanischen Beugungsgitters.

g	Gitterkonstante des Beugungsgitters.
Δg	Streuung der Gitterkonstante.
G_{et}	Etendue.
G_m	Mittleres Schubmodul.
g_{min}	Minimale Gitterkonstante, um einen Wellenlängenbereich durch das mikromechanische Beugungsgitter abtasten zu können, in Abhängigkeit des Öffnungswinkels Θ und dem für die Messung zulässigen Winkelbereich Ω_{sp} .
h	Strukturtiefe der Gitterstrukturen.
h_f	Höhe der Torsionsfeder.
I_{ges}	Eingestrahlte Lichtintensität.
$I_{n,G}$	Lichtintensität der n-ten Beugungsordnung eines Gitters.
I_t	Torsionsträgheitsmoment.
J	Trägheitsmoment der Gitterspiegelplatte.
k	Federkonstante.
l	Weglänge.
L_A	Fokuslänge des Parabolspiegels $P1$ NIR-Spektrometer.
L_B	Fokuslänge des Parabolspiegels $P2$ NIR-Spektrometer.
l_f	Länge der Torsionsfeder.
λ	Wellenlänge des Lichts.
λ_g	Grenzwellenlänge, bei der der Ausfallswinkel β genau 90° beträgt und die gebeugte Wellenlänge somit gerade noch propagiert.
λ_{max}	Maximale Wellenlänge eines gewählten Wellenlängenbereichs.
λ_{min}	Minimale Wellenlänge eines gewählten Wellenlängenbereichs.
λ_{Stab}	Wellenlängenstabilität, definiert als maximale Abweichung der gemessenen von der realen Wellenlänge.
Mag	Optische Vergrößerung des NIR-Spektrometers.
M_{el}	Elektrostatisches Drehmoment.
M_{mech}	Mechanisches Drehmoment.
N	Anzahl der Gitterlinien.
n	Beugungsordnung.
NA	Numerische Apertur.
n_B	Zur Messung verwendete Beugungsordnung.
N_S	Anzahl der aufgenommenen Messpunkte pro Messzyklus.

ϖ	Winkelgeschwindigkeit.
Ω	Torsionswinkel.
Ω_0	Schwingungsamplitude.
$\Omega_{0,max}$	Maximale Schwingungsamplitude.
Ω_D	Torsionswinkel, unter dem die Messdiode beleuchtet wird.
Ω_M	Gemessener Torsionswinkel.
Ω_{sp}	Winkelbereich, der zur Messung eines definierten Wellenlängenbereichs benötigt wird.
Φ	Lichtdurchsatz des NIR-Spektrometers.
Q_n	Spektrale Beugungseffizienz der n-ten Beugungsordnung.
R_q	Zeitintervall.
s	Stegbreite der Gitterstrukturen.
s_k	Elektrodenabstand der Kammelektroden.
$Slit_{aus}$	Ausgangsspalt reduzierter Breite.
$Slit_{in}$	Eingangsspalt reduzierter Breite.
t	Zeiteinheit.
T_{1-3}	Zeitintervalle.
t_m	Messzeit zur Aufnahme eines Spektrums.
t_{max}	Endzeitpunkt der spektralen Messung.
t_{mI}	Zeitliches Messintervall zwischen zwei Datenpunkten.
t_{min}	Startzeitpunkt der spektralen Messung.
t_{Stab}	Messzeitstabilität die benötigt wird, um Wellenlängenstabilität λ_{Stab} zu sichern.
τ	Steigungswinkel des Sinus.
τ_{tor}	Torsionsspannung in der Torsionsfeder.
τ_{zug}	Zugspannung in der Torsionsfeder.
Θ	Öffnungswinkel, definiert durch die Summe des Einfalls- und Ausfallswinkels.
U	Antriebsspannung des mikromechanischen Beugungsgitters.
U_R	Stabilitätsspannung bei Rotation.
U_S	Stabilitätsspannung.
U_T	Stabilitätsspannung bei Translation.
W	Ausdehnung des Beugungsgitters, definiert durch das Produkt der Gitterkonstante g mit der Anzahl der Gitterlinien N .
w_{aus}	Breite des Ausgangsspalts im NIR-Spektrometer.

w_{in}	Breite des Eingangsspalts im NIR-Spektrometer.
W_t	Torsionswiderstandsmoment.
ξ	Böschungswinkel von Gruben in monokristallinem Silizium.
z	Weglänge.

Abkürzungsverzeichnis

AFM	Atomares Kraft Mikroskop (Atomic Force Microscope).
BPSG	Bor Phosphor Silicat Glas.
CVD	Chemische Dampfabcheidung (Chemical Vapour Deposition).
PE-CVD	Plasma unterstütztes CVD (Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition).
DSP	Digitaler Signalprozessor (Digital Signal Processor).
FWHM	Volle Breite bei halbem Maximum (Full Width at Half Maximum).
HF	Flusssäure.
HNO_3	Salpetersäure.
InGaAs	Indium Gallium Arsenid.
IR	Infrarot.
FIR	Fernes Infrarot.
MIR	Mittleres Infrarot.
NIR	Nahes Infrarot.
KOH	Kaliumhydroxid.
LIGA	Lithografie, Galvanik und Abformung.
LSF	Linienpreizfunktion.
MEMS	Mikroelektromechanische Sysmteme.
MOEMS	Mikrooptoelektromechanische Sysmteme.
REM	Raster-Elektronen-Mikroskop.
RIE	Reaktives Ionenätzen (Reactive Ion Etch).
DRIE	Tiefes reaktives Ionenätzen (Deep Reactive Ion Etch).
SNR	Signal-zu-Rausch-Verhältnis.
SOI	Silizium auf Isolator (Silicon-on-Insulator).

TMAH Tetramethylammoniumhydroxid.

UV Ultraviolett.

1 Einleitung / Zielsetzung der Arbeit

Im Bereich der heutigen Analytik spielen optische Verfahren eine wichtige Rolle und kommen in unterschiedlichsten Anwendungen zum Einsatz. Von Vorteil ist dabei die berührungslose und zerstörungsfreie Messung mit Licht, die die Analyse von kritischen Substanzen deutlich vereinfacht. Die optische Spektroskopie nimmt dabei einen wichtigen Teil der Analytik ein. Grundsätzlich stellen die gemessenen Spektren die Reflexions-, Transmissions- oder Absorptionsintensitäten bei einzelnen Wellenlängen innerhalb des interessierenden spektralen Bereichs der elektromagnetischen Strahlung dar.

Der in der optischen Spektroskopie verwendete Spektralbereich erstreckt sich von der kurzwelligen ultravioletten (UV) bis zur fernen Infrarot-Strahlung (FIR). Die Auswahl des Wellenlängenbereichs hängt dabei maßgeblich von den jeweiligen Wechselwirkungen der zu untersuchenden Moleküle mit der elektromagnetischen Strahlung ab. Vom ultravioletten bis in den sichtbaren Bereich entstehen Absorptionsintensitäten durch Änderungen des Zustands der äußeren Elektronen, im Infrarot-Bereich (IR) sind es hingegen Änderungen des Schwingungszustands der Moleküle [1]. Da der molekulare Schwingungszustand die Erkennung von Molekülen und die Analyse ihres Bindungszustands (Einfach-, Zweifach- und Dreifachbindung) ermöglicht, ist die IR-Spektroskopie in vielen Bereichen von besonderem Interesse.

Der IR-Bereich unterteilt sich allgemein in den nahen Infrarot-Bereich (NIR), den mittleren Infrarot-Bereich (MIR) und den fernen Infrarot-Bereich (FIR) [2]. Gängige Verfahren in diesem Spektralbereich sind die NIR-Spektroskopie, MIR-Spektroskopie, Ramanspektroskopie [3] und die Fluoreszenzspektroskopie [4]. Während die Ramanspektroskopie auf Streuung basiert und die Fluoreszenz-Spektroskopie ein Emissionsspektrum aufzeichnet, basiert die MIR- und NIR-Spektroskopie auf der Absorption durch Änderungen des molekularen Schwingungszustands, wodurch stärkere Messsignale erreicht werden können. Grundsätzlich werden im MIR- und FIR-Bereich vorwiegend Grundschwingungen der Moleküle angeregt, im NIR-Bereich dominieren dagegen Oberschwingungen der Moleküle, wodurch sich der Analysebereich deutlich vergrößert.

Die NIR-Spektroskopie ermöglicht neben der Untersuchung von polaren Bindungen (*CH*, *NH*, *OH*, etc.) auch die Analyse von Molekülgruppen und deren Bindungszustand [5]. Für die meisten Moleküle liegt die Bandbreite der NIR-Absorptionspeaks, definiert als volle Breite bei halbem Maximum (FWHM), dabei oberhalb von 10 nm [6], Anwendungsgebiete der NIR-Spektroskopie finden sich beispielsweise in der chemischen, wie auch der Lebensmittelindustrie.

Heutzutage sind eine Vielzahl von NIR-Spektrometern erhältlich. Neben Fourier-Transform-Spektrometern, die hauptsächlich im MIR-Bereich eingesetzt werden, lassen sich NIR-Spektrometer grundsätzlich in zwei Gruppen einteilen, Spektrografen und Monochromatoren [24], die auf dispersiven Elementen basieren. Dabei ist das dispersive Element in Spektrografen fest eingebaut,

in Monochromatoren beweglich. Spektrografen benötigen aus diesem Grund Diodenzeilen als fotosensitives Element, auf die das erzeugte Spektrum abgebildet wird. Monochromatoren besitzen im Vergleich nur eine Diode als Einzeldetektor, das Spektrum wird mittels Drehung des dispersiven Elements durch Änderung der Winkelverhältnisse aufgenommen. Im Vergleich können Spektrografen robust aufgebaut werden, Monochromatoren besitzen im NIR-Bereich einen Kostenvorteil aufgrund des Einzeldetektors als fotosensitives Element.

Durch die Verwendung der Mikrotechnologie gab es in den letzten Jahren mehrere Ansätze, miniaturisierte IR-Spektrometer zu entwickeln. Hierzu zählt der Spektrograf, basierend auf der Rowland-Konfiguration, von Krippner et al. [32], der vollständig mit LIGA-Technik (Lithografie, Galvanik und Abformung) hergestellt wurde. Eine gute Übersicht von integrierten optischen Mikrospektrografen, die in siliziumbasierter Mikromechanik (MEMS) hergestellt werden und geringe Abmessungen von wenigen Millimetern aufweisen, wurde darüber hinaus von R.F. Wolffenbuttel veröffentlicht [38]. Ein auf einem Monochromatorsystem basierender Ansatz zum Aufbau eines miniaturisierten IR-Spektrometers wurde von Gessner et. al. beschrieben [40, 41], der eine angepasste Fastie-Ebert-Konfiguration nutzt. Durch Einbau eines zusätzlichen mikromechanischen Spiegels kann die zu detektierende Wellenlänge eingestellt werden.

Ziel dieser Arbeit ist es, die Vorteile der Mikromechanik zu nutzen und ein mikromechanisches Beugungsgitter zu entwickeln, das in einem neuartigen miniaturisierten NIR-Spektrometer eingesetzt werden kann. Das Beugungsgitter basiert dabei auf einem resonant scannenden Mikrospiegel [52], der als mikrooptoelektromechanisches System (MOEMS) mittels Silizium-Volumen-Mikromechanik hergestellt wird. Dabei bietet der Einsatz des mikromechanischen Beugungsgitters die Möglichkeit ein äußerst kompaktes und robustes NIR-Spektrometer zu entwickeln, das als Monochromatorsystem mit Czerny-Turner-Konfiguration einen deutlichen Kostenvorteil gegenüber derzeitigen NIR-Spektrografen erzielt. Parallel hierzu müssen die messtechnischen Anforderungen der Anwendungsgebiete berücksichtigt und gleichzeitig gesichert werden. Aus diesem Grund wurde als Entwicklungsziel ein Wellenlängenbereich von 900 nm - 2500 nm bei einer spektralen Auflösung von 10 nm und einer Messzeit eines Einzelspektrums von 10 ms festgelegt. Das miniaturisierte NIR-Spektrometer sollte eine kompakte Bauform besitzen, um es perspektivisch als Handheld-Gerät einsetzen zu können.

Um diese Zielsetzungen zu erreichen, müssen die Anforderungen an das mikromechanische Beugungsgitter zwingend an den Randbedingungen des NIR-Spektrometers gespiegelt und mit ihnen in Übereinstimmung gebracht werden. Dafür ist es essenziell, die optischen und mechanischen Eigenschaften des mikromechanischen Beugungsgitters zu analysieren, dimensionieren und zu optimieren. Neben der Größe, Beugungseffizienz und der Festlegung einer geeigneten Gitterkonstante zählen hierzu ebenso die Schwingungsfrequenz, Schwingungsstabilität, Schockfestigkeit sowie die Entwicklung eines Verfahrens zur Detektion des Torsionswinkels und zur Regelung der Schwingungsamplitude. Diese wichtigen Eingangsgrößen bestimmen in direkter Weise die erreichbare Leistungsfähigkeit des neuartigen miniaturisierten NIR-Spektrometers.

Zusammengefasst ergeben sich folgende Ziele, die in dieser Arbeit verfolgt werden:

- Entwicklung eines mikromechanischen Beugungsgitters mit hoher spektraler Effizienz basierend auf resonant scannenden Mikrospiegeln

-
- Dimensionierung des NIR-Spektrometers mit Czerny-Turner-Konfiguration unter Berücksichtigung der Wechselwirkung mit dem mikromechanischen Beugungsgitter
 - Entwicklung der Amplitudenregelung und Auswertung des mikromechanischen Beugungsgitters als Eingangsgröße der Spektrenberechnung
 - Evaluation der hergestellten mikromechanischen Beugungsgitter, als Einzelement und im Einsatz des miniaturisierten NIR-Spektrometers
 - Nachweis der Leistungsfähigkeit des miniaturisierten NIR-Spektrometers

Hierzu ist die Arbeit wie folgt gegliedert:

Im einleitenden Kapitel 2 wird in konzentrierter Form eine Übersicht der Messmethodik und der Anwendungsgebiete in der NIR-Spektroskopie gegeben. Hieran angelehnt werden auch die dem Stand der Technik entsprechenden NIR-Spektrometer unter Berücksichtigung ihrer Leistungsfähigkeit erläutert, die als Messgeräte derzeit zum Einsatz kommen. Aus diesen Aspekten abgeleitet, werden sinnvolle Zielspezifikationen des in dieser Arbeit zu entwickelnden MEMS-basierten NIR-Spektrometers erarbeitet und festgelegt, die sowohl die Anforderungen der Anwendungsgebiete erfüllen, als auch eine kostengünstige Realisierung ermöglichen und als Entwicklungsparameter dienen.

In Kapitel 3 werden die für diese Arbeit notwendigen theoretischen Grundlagen eingeführt, Bezug nehmend auf die Beugung am Reflexionsgitter, den grundsätzlichen Eigenschaften des Czerny-Turner-Monochromators und den Materialeigenschaften einkristallinem Siliziums, das als Basismaterial der mikromechanischen Beugungsgitter eingesetzt wird.

Kapitel 4 beinhaltet alle relevanten Aspekte des Designs und der Dimensionierung des mikromechanischen Beugungsgitters, die immer auch an den Anforderungen mit dem zu entwickelnden, miniaturisierten NIR-Spektrometer und an den Zielspezifikationen gespiegelt werden müssen. Darüber hinaus wird ebenso die zur Spektrenberechnung notwendige Signalverarbeitung erarbeitet und detailliert erörtert.

Aufbauend hierauf erfolgt in Kapitel 5 die Darstellung der Technologieentwicklung zur Herstellung mikromechanischer Beugungsgitter. Hierzu zählt insbesondere das Beugungsgitter selbst, die Entwicklung und Evaluierung möglicher Herstellungsverfahren, spezielle Kontrollstrukturen zur Prozessüberwachung, Simulationen der erreichbaren Beugungseffizienz unter Berücksichtigung der herstellungsspezifischen Streuung sowie die Bewertung der Prozessstreuung im Hinblick auf die Wechselwirkungen für den Einsatz im NIR-Spektrometer.

Kapitel 6 umfasst die Charakterisierung der gefertigten mikromechanischen Beugungsgitter im Hinblick auf die erreichte Beugungseffizienz, sowie Messaufbau, Messung und Analyse der optischen und mechanischen Leistungsfähigkeit. Dies beinhaltet auch die Evaluierung der Beugungsgitter im Vergleich zu den hergeleiteten Anforderungen aus Design und Dimensionierung.

In Kapitel 7 wird eine finale Evaluierung der mikromechanischen Beugungsgitter vorgenommen, indem die erreichte Leistungsfähigkeit des neuartigen, MEMS-basierten miniaturisierten NIR-Spektrometers analysiert wird. Hierzu erfolgen spektrale Messungen an standardisierten Proben,

die Ergebnisse werden an den in dieser Arbeit festgelegten Zielspezifikationen gespiegelt.

Kapitel 8 beinhaltet abschließend eine Zusammenfassung dieser Arbeit und einen Ausblick über zukünftige Entwicklungsmöglichkeiten.

2 Stand der Technik

In diesem Kapitel wird zunächst die grundsätzliche Messmethodik der NIR-Spektroskopie unter Berücksichtigung verschiedener Anwendungsgebiete eingeführt. Dann erfolgt ein Überblick bereits bestehender makroskopischer wie auch miniaturisierter NIR-Spektrometer inklusive der Funktionsweise und der wichtigsten Leistungsparameter. Abgeleitet aus diesen Informationen werden Zielspezifikation eines MEMS-basierten miniaturisierten NIR-Spektrometers entwickelt, die sich sowohl an den Anforderungen der Anwendungen wie auch an NIR-Spektrometern, die dem Stand der Technik entsprechenden, orientieren. Diese Zielspezifikationen bilden die Grundlage der in dieser Arbeit vorgestellten Entwicklungen.

2.1 Messmethodik und Anwendungsgebiete der NIR-Spektroskopie

Der Infrarot-Bereich (IR) erstreckt sich über eine Wellenlänge von 780 nm bis 1 mm und wird im Wesentlichen in drei Bereiche unterteilt, dem nahen Infrarot-Bereich (NIR) zwischen 780 nm und $3\text{ }\mu\text{m}$, dem mittleren Infrarot-Bereich (MIR) $3\text{ }\mu\text{m}$ bis $50\text{ }\mu\text{m}$ und dem fernen Infrarot-Bereich (FIR) zwischen $50\text{ }\mu\text{m}$ bis 1 mm [2]. Werden Moleküle im IR-Bereich bestrahlt, wird ein spezifischer Teil der Strahlung absorbiert und in molekulare Schwingungen umgewandelt. Dabei sind sowohl die Wellenlängen wie auch das Intensitätsverhältnis der absorbierten Energie für jedes Molekül spezifisch.

Grundsätzlich kann die molekulare Struktur zu Grund- wie auch zu Oberschwingungen angeregt

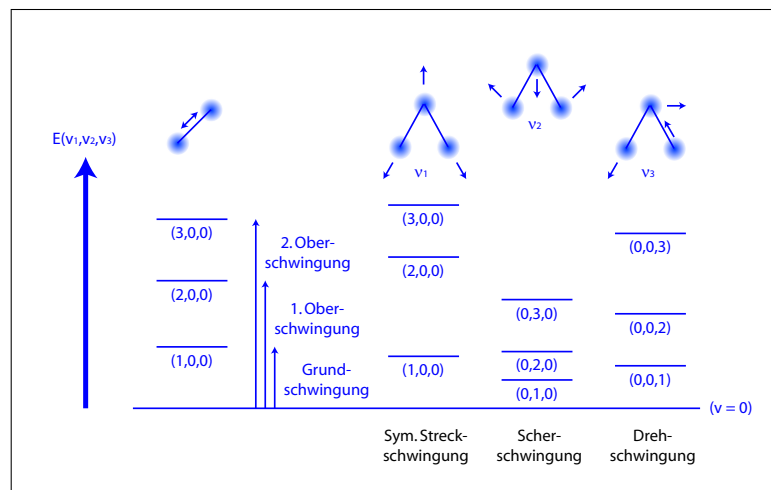


Abbildung 2.1: Prinzipielle Schwingungsmoden von Grund- und Oberschwingungen für 2- und 3-atomige Moleküle im Infrarot-Bereich mit Energieniveaus $E(\nu)$

Tabelle 2.1: Absorptionswellenlänge und Vibrationsbanden am Beispiel von H_2O [6]

	H_2O	v_1	v_2	v_3
	Absorption / nm			
Grundschiwingung	2735	1	0	0
	6271	0	1	0
	2663	0	0	1
1. Oberschiwingung	1389	2	0	0
	3173	0	2	0
	1343	0	0	2
	1910	1	1	0
	1379	1	0	1
	1875	0	1	1
2. Oberschiwingung	943	3	0	0
	2143	0	3	0
	906	0	0	3
	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

werden [5, 6]. Dabei erhöht sich der Freiheitsgrad der molekularen Schwingungen mit der Anzahl der gebundenen Atome im Molekül. In Abb. 2.1 sind die unterschiedlichen Anregungsmoden der molekularen Struktur beispielhaft für 2- und 3-atomige Moleküle aufgezeigt. Grundschiwingungen werden dabei meist im MIR-Bereich angeregt, während Absorptionen im NIR-Bereich durch Oberschiwingungen und kombinierte Schwingungsmoden ausgelöst werden [7]. Beispielhaft ist dies in Tab. 2.1 für H_2O dargestellt. Da gleichzeitig die Übergangswahrscheinlichkeit im NIR-Bereich deutlich geringer ist als im MIR-Bereich, sind folglich auch die zu beobachtenden Absorptionen im NIR-Bereich um den Faktor 10 - 100 geringer. Umso wichtiger ist deshalb eine hohe optische Qualität der NIR-Spektrometer. Typische Moleküle, deren Absorptionsbanden sich im NIR-Bereich befinden, sind beispielsweise CH_3 , CH_2 , CH , OH , NH_2 . Dabei liegt die Bandbreite der Absorptionspeaks im Allgemeinen oberhalb von 10 nm (s. Anhang Tab. 9.1).

Die Anwendungsbereiche der NIR-Spektroskopie sind weit gefächert [5] und erstrecken sich von chemischen Analysen [8, 9], Prozessüberwachung [10, 11], Untersuchungen von Polymeren und Textilien [12, 13, 14] bis hin zu Frucht- und Samenkontrollen [15, 16] (s. Tab. 2.2). Grundsätzlich muss dabei zwischen quantitativen und qualitativen Analysen unterschieden werden [6]. Während quantitative Analysen sowohl die Untersuchung von Inhaltsstoffen als auch deren Konzentration in einer Probe beinhalten, findet bei qualitativen Analysen eine diskrete Bewertung der Probe statt (gut oder schlecht) [17].

Die Auswertung der gemessenen NIR-Spektren ist dabei nicht trivial. Grund dafür sind zum Einen die breitbandigen Absorptionspeaks im NIR-Bereich, die sich oft überlappen, zum Anderen werden NIR-Spektren durch äußere Wechselwirkungen beeinflusst.

Hierzu zählen

- Änderungen durch Temperaturvariationen [18]
- die Wechselwirkung zwischen den zu analysierenden Komponenten
- die Absorptionseigenschaften der Probe (Festkörper, Pulver oder diffuse Flüssigkeiten)
- die Variationen in der Weglänge der Probe
- die Variationen der NIR-Messung selbst, hervorgerufen durch Messungenauigkeiten des Spektrometers

Für eine zuverlässige Spektrumanalyse wird deshalb von der Annahme ausgegangen, dass das aufgenommene Spektrum als Superposition von Einzelspektren der Moleküle interpretiert werden kann. Durch mathematische Algorithmen lassen sich diese Einzelspektren isolieren und mit Kalibrationsspektren der einzelnen Komponenten vergleichen.

Aufgrund der vielen messtechnischen Abhängigkeiten und den damit verbundenen komplexen Zusammenhängen gibt es eine Vielzahl von mathematischen Algorithmen zur Auswertung von NIR-Spektren, die meist auf statistischen Ansätzen basieren [19, 20]. Hierzu wird an dieser Stelle nicht weiter eingegangen, da Details zu diesem Thema außerhalb des Fokus dieser Arbeit liegen. Die aufwendige Bewertung der NIR-Spektren und die Breite der Anwendungen zeigen jedoch, dass hohe Anforderungen an die Leistungsfähigkeit der NIR-Spektrometer gestellt werden, insbesondere in der Wellenlängenstabilität, der Messzeit, des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses (SNR) und dem Lichtdurchsatz.

Tabelle 2.2: *Anwendungen und Einsatzbereiche der NIR-Spektroskopie*

	Einsatzbereich	Anwendung
Industrie	Chemie	Chemische Reaktionen, Prozesskontrolle
	Umwelt	Abgaskontrolle
	Textilien	Qualitätskontrolle
	Recycling	Plastik-, Papiersortierung
Agrikultur	Getreide und Saatgut	Nährstoffgehalt, Reifegrad
	Früchte und Gemüse	Qualitätskontrolle, Reifegrad, Inhaltsstoffe
Medizin	Pharmazie	Inhaltsstoffe, Qualitätskontrolle
	Medizinische Diagnostik	Gewebeanalyse, Sauerstoffgehalt im Blut

2.2 NIR-Spektrometer

Analysegeräte im NIR-Bereich sind aufgrund der vielen Anwendungen weit gefächert. Allgemein können NIR-Spektrometer in vier verschiedene Gruppen eingeteilt werden: Fourier-Transform-Spektrometer [21, 22], filterbasierte Spektrometer [23], sowie Spektrografen und Monochromatoren [24], die auf dispersiven Elementen basieren. Auf Letztere soll der Fokus in dieser Übersicht gerichtet werden, da sie derzeit den Markt im NIR-Bereich dominieren.

Spektrografen sind Spektrometersysteme, die mehrere Bilder eines beleuchteten Eingangsspalt erzeugen und komplett auf ein fotosensitives Element abbilden, wobei der Ort jedes Bildes eine Funktion der Wellenlänge darstellt. Spektrografen besitzen ein festes Gitter oder Prisma als dispersives Element [25] und eine Diodenzeile oder ein CCD-Element als Detektor. Das gesamte Spektrum wird zu einem festen Zeitpunkt aufgenommen und auf den Detektor abgebildet. Dadurch ist die erreichbare spektrale Auflösung direkt abhängig von der Auflösung des verwendeten Detektors. Sie lässt sich näherungsweise abschätzen, indem der gemessene Spektralbereich durch die Anzahl der sensitiven Elemente (meist Dioden) des Detektors geteilt wird.

Monochromatoren sind dagegen Spektrometersysteme, die ausschließlich ein Bild des beleuchteten Eingangsspalt erzeugen und auf einen Ausgangsspalt abbilden. Die transmittierte Wellenlänge wird dabei durch den Winkel des dispersiven Elements (Gitter oder Prisma) zum einfallenden und ausfallenden Lichtstrahl festgelegt. Durch Drehung des dispersiven Elements kann das Spektrum abgetastet werden. Dadurch ist nur eine Diode als Einzeldetektor notwendig. Das aufgenommene Intensitätssignal ist winkelabhängig und muss zur Rekonstruktion des Spektrums mit dem Drehwinkel des dispersiven Elements verknüpft werden. Die spektrale Auflösung von Monochromatoren ist vom Eingangs- und Ausgangsspalt, der Fokusslängen und von den Eigenschaften des dispersiven Elements abhängig.

Der Vorteil von Spektrografen liegt in Ihrem festen Aufbau ohne bewegliche Teile. Dadurch können sie sehr robust aufgebaut werden. Nachteilig ist dagegen das als Detektor benötigte Diodenarray. Im NIR-Bereich können wegen der benötigten direkten Bandlücke nur Dioden aus

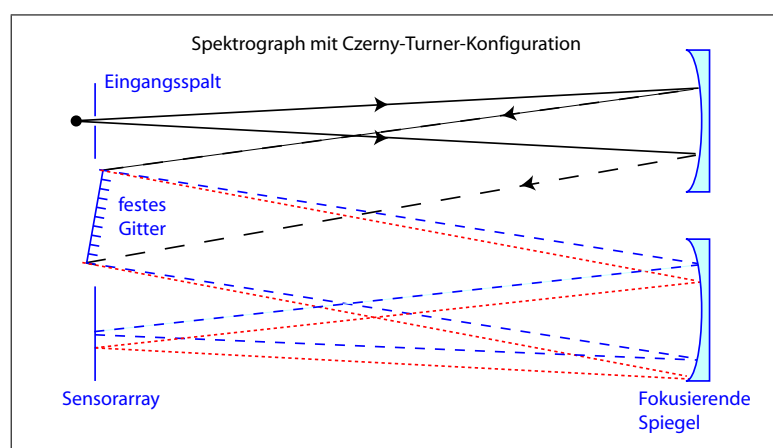


Abbildung 2.2: Prinzipskizze eines Spektrografen mit Czerny-Turner-Konfiguration

Indium-Gallium-Arsenid (InGaAs) als Detektoren eingesetzt werden [26]. Im Gegensatz zu siliziumbasierten Detektoren für den sichtbaren Bereich [27] sind diese sehr teuer. Der Preis hängt zudem direkt von der Anzahl der Dioden im Detektor ab, typische Werte sind 256, 512 und 1024 Dioden [28].

Trotzdem bestimmen wegen fehlender Alternativen immer noch NIR-Spektrografen den Markt. Hauptgrund hierfür ist, dass die kontinuierliche Rotation des dispersiven Elements im Monochromator sehr genau gesteuert und kontrolliert werden muss, da sie direkten Einfluss auf die Stabilität des bestimmten Spektrums hat. Eine typische Einzelmessung, die vergleichbar mit NIR-Spektrografen bei 10 ms liegt [29], stellt deshalb enorme Anforderungen an die Mechanik im makroskopischen Bereich, die den Kostennachteil des teuren InGaAs-Diodenarrays offensichtlich nicht kompensieren kann.

Zu typischen NIR-Spektrometern, die kommerziell erhältlich sind, gehört die Spektrografen-Reihe „NIR-Quest“ der Firma Ocean-Optics [29]. Sie sind kompakt aufgebaut mit einer Größe von $18,2 \times 11 \times 4,7 \text{ cm}^3$ und basieren auf einer Czerny-Turner-Konfiguration (s. Abb. 2.2). Für einen Wellenlängenbereich von $900 - 2500 \text{ nm}$ werden InGaAs-Detektoren mit 256- und 512-Dioden verwendet, der Spektrograf erreicht damit eine spektrale Auflösung von $9,5 \text{ nm}$ und $6,3 \text{ nm}$ bei einer Eingangsspaltbreite von $25 \mu\text{m}$. Die minimale Messzeit beträgt 1 ms , um ein höheres SNR zu erreichen, sind auch Integrationszeiten von bis zu 400 ms möglich. Diese Systeme werden derzeit für ca. 16.000 *Euro* angeboten.

Alternativ gibt es NIR-Spektrografen der Firma BaySpec Inc, die in einer Größe von $8,8 \times 12,2 \times 3,9 \text{ cm}^3$ erhältlich sind [30, 31]. Sie basieren auf einem Phasengitter als dispersives Element, dass aus wasserlöslichem Polymer mittels Laserbehandlung hergestellt wird. Das Gitter wird transmittierend in den Strahlengang des Spektrometers eingebaut. Der NIR-Spektrograf wird in einem Wellenlängenbereich von $900 - 2500 \text{ nm}$ und einem InGaAs-Detektor mit 256-Dioden angeboten. Die spektrale Auflösung liegt abhängig von der Eingangsspaltbreite bei $5 - 20 \text{ nm}$, die Messzeit kann zwischen $20 \text{ ms} - 30 \text{ s}$ gewählt werden.

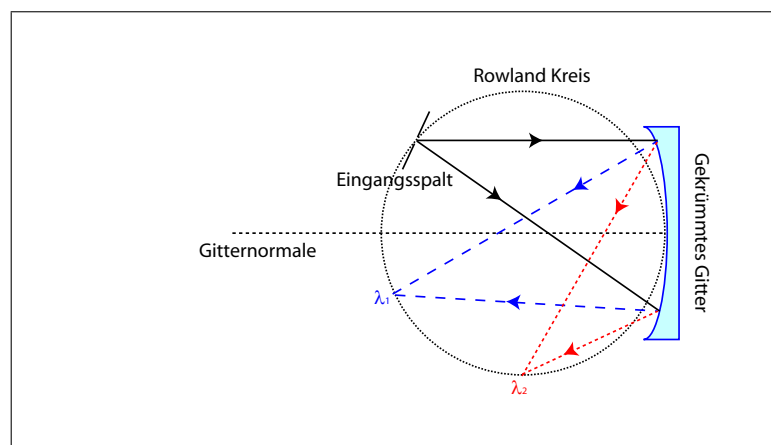


Abbildung 2.3: Prinzipskizze eines Spektrografen mit Rowland-Konfiguration basierend auf einem sphärisch gekrümmten Reflexionsgitter

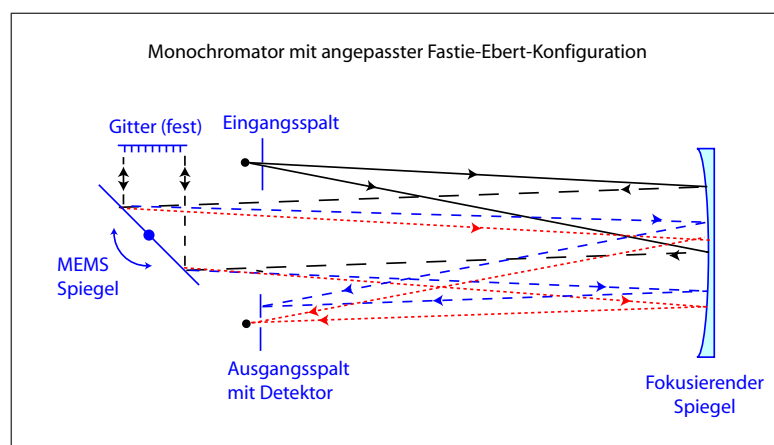


Abbildung 2.4: Prinzipskizze eines Monochromators basierend auf einer angepassten Fastie-Ebert-Konfiguration mit beweglichem Reflexionsgitter

In den letzten Jahren führte vor allem der Einsatz der Mikrosystemtechnik zu Weiterentwicklungen von NIR-Spektrometern. Dabei ging die Entwicklung vor allem in Richtung Miniaturisierung von Gesamtsystemen aber auch von Bauteilen. Krippner et. al. veröffentlichte 1999 den Aufbau eines NIR-Spektrografen [32], der ausschließlich durch LIGA-Technik (Lithografie, Galvanik und Abformung) [33] hergestellt wurde. Die LIGA-Technik basiert auf der Herstellung eines Metallmasters mittels Röntgenlithografie und Galvanik, der in einem zweiten Schritt zur Abformung in Polymeren eingesetzt wird.

Inzwischen wird der NIR-Spektrograf durch die Firma microParts [34] vertrieben. Er basiert auf der Rowland-Konfiguration [35] (s. Abb. 2.3), bei der ein sphärisch gekrümmtes Reflexionsgitter als dispersives Element verwendet wird. Der optische Teil dieses Spektrografen weist Abmessungen von nur $6,1 \times 4,3 \times 1,5 \text{ cm}^3$ auf, inklusive Auswerte-Elektronik ergibt sich eine Größe von $10,8 \times 7,7 \times 2,2 \text{ cm}^3$. Der Wellenlängenbereich erstreckt sich von $900 \text{ nm} - 1700 \text{ nm}$, der InGaAs-Detektor besitzt ein 128-Diodenarray. Die spektrale Auflösung liegt unter 16 nm , die Messzeit kann zwischen $2 \text{ ms} - 40 \text{ s}$ eingestellt werden.

Ein etwas differenzierter Ansatz wird von der Firma ThermoScientific umgesetzt, die ein Handheld NIR-Spektrometer vertreibt, das auf einem von Senturia et. al. entwickelten Hadamard NIR-Spektrometer basiert [36, 37]. Das System ist nicht eindeutig den Spektrografen zuzuordnen, verwendet allerdings ein Gitter als dispersives Element. Über eine Faser wird das Licht im Spektrometer auf ein festes Gitter geleitet. Das so erzeugte Spektrum wird über einen Spiegel auf den zentralen MEMS-Chip abgebildet, der aus einem Array von beweglichen Balkenstrukturen besteht. Durch Absenken ausgewählter Balkenstrukturen im Chip kann orts aufgelöst zwischen benachbarten Balken ein Phasengang von $\lambda/4$ erzeugt werden, wodurch die dort befindliche Wellenlänge durch destruktive Interferenz ausgeblendet werden kann. Nur das Licht der weiterhin propagierenden Wellenlängen wird auf einen Einzeldetektor zur Messung der Intensität geführt. Durch Verwendung einer Hadamard-Matrix, die durch den MEMS-Chip realisiert wird, kann das zeitabhängige Intensitätssignal des Einzeldetektors so in das NIR-Spektrum umgerechnet wer-

den. Dieses miniaturisierte Handheld NIR-Spektrometer mit einer Größe von $25 \times 29 \times 15 \text{ cm}^3$ arbeitet in einem Wellenlängenbereich von $1600 - 2400 \text{ nm}$ mit einer spektralen Auflösung von 12 nm . Die Messzeit liegt bei weniger als 3 s .

Eine gute Übersicht von weiteren MEMS-basierten, miniaturisierten NIR-Spektrometern wurde von R. F. Wolffenbuttel et. al. veröffentlicht [38]. Eine Studie über einen vollständig in Silizium gefertigten NIR-Spektrograph mit Abmessungen von nur wenigen Millimetern wurde ebenfalls präsentiert [39]. Der Wellenlängenbereich dieses Mikrospektrometers reicht von $1 - 9 \mu\text{m}$ und überspannt damit fast vollständig den NIR-Bereich bis in den IR-Bereich hinein. Das Detektorarray ist durch Thermopiles in Silizium gefertigt, durch die begrenzte Fokusslänge liegt die spektrale Auflösung allerdings nur bei 500 nm . Für die meisten Anwendungen im NIR-Bereich ist dies zu gering.

Ein miniaturisiertes NIR-Spektrometer, das einen Monochromator-Aufbau nutzt, wurde von Otto et. al. veröffentlicht [40, 41]. Der Monochromator basiert auf einer angepassten Fastie-Ebert-Konfiguration [42], wobei ein MEMS-basierter mikromechanischer Spiegel genutzt wird, um das Spektrum zeitabhängig durchzustimmen (s. Abb. 2.4). Das verwendete Reflexionsgitter

Tabelle 2.3: Übersicht von NIR-Spektrometern mit einer Leistungsfähigkeit dem Stand der Technik entsprechend

	Typ	Wellenlänge	Detektor (InGaAs)	Spektrale Auflösung	Messzeit / ms	Baugröße / cm^3
Ocean-Optics	Spektrograph	900 - 2500 nm	Array (256)	9,5 nm	1 - 400	18,2 x 11 x 4,7
Ocean-Optics	Spektrograph	900 - 2500 nm	Array (512)	6,3 nm	1 - 400	18,2 x 11 x 4,7
BaySpec Inc.	Spektrograph	900 - 2500 nm	Array (256)	5 nm - 20 nm	20 - 30000	8,8 x 12,2 x 3,9
micro-Parts	Spektrograph	900 - 1700 nm	Array (128)	< 16 nm	2 - 40000	10,8 x 7,7 x 2,2
Thermo Scien.	Spektrograph	1600 - 2400 nm	Einzel-Detektor	12 nm	< 3000	25 x 29 x 15
Wolffenbuttel	Spektrograph	1000 - 9000 nm	Array (16) Thermopiles	500 nm	k. A.	wenige Millimeter
Otto	Monochromator	1000 - 2100 nm	Einzel-Detektor	$\approx 15 \text{ nm}$	> 2	k. A.

ist in diesem Aufbau fest. Der Wellenlängenbereich liegt bei $1000 - 2100 \text{ nm}$ mit einer spektralen Auflösung von ca. 15 nm . Die Frequenz des Mikrospiegels liegt bei 250 Hz , ein Spektrum kann dadurch innerhalb von 2 ms abgetastet werden, Mittelungen über mehrere Spektren sind ebenfalls möglich. Sowohl über die spektrale Stabilität des ermittelten NIR-Spektrums als auch über die Positionsdetektion des Mikrospiegels, die signifikante Parameter für Monochromatoren darstellen, konnten leider keine Datenangaben gefunden werden.

Ein gesammelter Überblick über die Leistungsfähigkeit aller hier vorgestellten NIR-Spektrometer ist in Tab. 2.3 dargestellt. In Kombination mit den Anforderungen der Anwendungsgebiete wurden hieraus die notwendigen Entwicklungsparameter des neuen miniaturisierten NIR-Spektrometers abgeleitet, die im nächsten Kapitel im Detail beschrieben werden.

2.3 Festlegung der Entwicklungsparameter

Die Übersicht der dem Stand der Technik entsprechenden NIR-Spektrometer zeigt, dass viele miniaturisierte Systeme als Spektrografen mit teuren InGaAs-Arrays als Detektor aufgebaut sind. Obwohl preisintensiv, verfügen diese Systeme über eine gute spektrale Auflösung unterhalb von 10 nm , einen breiten Spektralbereich, der den NIR-Bereich nahezu vollständig abdeckt, kurze Messzeiten und eine kompakte Bauform. Ein geringerer Anteil verwendet Monochromatoren, die nur einen InGaAs-Einzeldetektor benötigen. Die Detektoreinheit ist dadurch zwar deutlich günstiger (s. Tab. 2.3), jedoch erreichen diese Systeme in der spektralen Auflösung, dem Spektralbereich oder auch der Messzeit nicht die Leistungsfähigkeit von Spektrografen. Über die spektrale Stabilität, die gerade bei Monochromator-Systemen eine wichtige Größe darstellt, lassen sich überhaupt keine Angaben finden.

In der vorliegenden Arbeit wird deshalb ein Ansatz für ein miniaturisiertes NIR-Spektrometer verfolgt, das auf einem Monochromator-System basiert und damit den preislichen Vorteil eines InGaAs-Einzeldetektors nutzt, gleichzeitig aber auch eine hohe Leistungsfähigkeit in Bezug auf die spektrale Auflösung, der spektralen Stabilität, der Schockfestigkeit und einer geringe Messzeit erreichen soll, um die Anforderungen der Anwendungen im NIR-Bereich erfüllen zu können.

Um dies zu realisieren, wird für das dispersive Element im NIR-Spektrometer ein neues, MEMS-basiertes, mikromechanisches Beugungsgitter entwickelt, das resonant betrieben wird. Dabei wird ausgenutzt, dass mikromechanische Bauteile im Gegensatz zu makroskopischen geringe Massen und eine geringe Leistungsaufnahme aufweisen. Die Bewegung mikromechanischer, resonanter Systeme ist dabei meist durch eine hohe Güte gekennzeichnet. Um das miniaturisierte Beugungsgitter in das NIR-Spektrometer zu integrieren, wurde eine Czerny-Turner-Konfiguration gewählt, eine Prinzipskizze ist in Abb. 2.2 dargestellt. Die zu untersuchende Probe wird dabei vor dem NIR-Spektrometer in den Strahlengang eingebracht.

Die Czerny-Turner-Konfiguration besteht aus einem Eingangsspalt, einem gekrümmten Spiegel, um das Licht zu kollimieren, dem mikromechanischen Beugungsgitter, um das kollimierte Licht spektral aufzuteilen und einem weiteren gekrümmten Spiegel, der das erzeugte Spektrum auf den Ausgangsspalt abbildet. Abhängig von der Winkelposition der Gitterspiegelplatte kann eine spezifische Wellenlänge durch den Ausgangsspalt transmittieren. Hinter dem Ausgangsspalt

befindet sich eine InGaAs-Diode, die als Detektor die Intensität bestimmt.

Durch die kontinuierliche, resonante Bewegung des mikromechanischen Beugungsgitters ändert sich die Winkelposition, das Spektrum streicht über den Ausgangsspalt und wird durch den Detektor zeitabhängig aufgezeichnet. Um das gemessene Spektrum zu rekonstruieren, müssen die so aufgenommenen zeitabhängigen Intensitätswerte mit der jeweiligen Position des mikromechanischen Beugungsgitters korreliert werden. Bei einer kontinuierlichen Bewegung des Beugungsgitters bedeutet dies eine genaue Bestimmung der Winkelposition, die berücksichtigt werden muss.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung eines MEMS-basierten, mikromechanischen Beugungsgitters, dessen Einsatz es ermöglicht, ein robustes, kostengünstiges und miniaturisiertes NIR-Spektrometer aufzubauen. Die Arbeit basiert dabei auf einer ersten Studie im sichtbaren Wellenlängenbereich, wodurch die grundsätzliche Machbarkeit bereits nachgewiesen werden konnte [43]. Um allerdings die zuvor beschriebene Leistungsfähigkeit des NIR-Spektrometers zu erreichen, muss ein optimiertes Optikdesign für den NIR-Bereich erstellt werden, das auch das zu entwickelnde, mikromechanische Beugungsgitter berücksichtigt.

In dieser Arbeit wird somit erstmalig eine gezielte Weiterentwicklung vorgestellt, die sowohl die Wechselwirkungen zwischen dem speziellen mikromechanischen Beugungsgitter, der Optik des NIR-Spektrometers, wie auch der Auswertung des zeitlichen Intensitätssignals bis zum aufbereiteten NIR-Spektrum beinhaltet. Im Detail umfasst dies die mechanischen Eigenschaften des mikromechanischen Beugungsgitters, die Größe, die Frequenz, die benötigte Antriebsspannung, die Schwingungsamplitude, das Schwingungsverhalten inklusive der Regelung und Kontrolle der erreichten Schwingungsstabilität sowie die mechanische Schockfestigkeit des Bauelements. Hinzu kommen die optischen Eigenschaften des integrierten Gitters, die Festlegung der Gitterkonstan-

Tabelle 2.4: Zielspezifikationen für das miniaturisierte NIR-Spektrometer

Parameter	Einheit	Min	Typ	Max
Wellenlänge	nm	900	–	2500
Spektrale Auflösung	nm	–	10	–
Spektrale Stabilität	nm	–	1	–
Einkoppelfaser Durchmesser	μm	–	50	–
Einkoppelfaser (Numerische Apertur NA)	–	–	0,22	–
Detektoranzahl	–	–	–	1
Öffnungswinkel Θ	°	–	15	–
Messzeit Einzelspektrum	ms	–	–	10
Verfügbare Spannung	V	–	–	36
Verwendete Beugungsordnung n_B	–	–	1	–
Schockfestigkeit mikromech. Beugungsgitter	m/s^2	2000g*	–	–
Spektrale Beugungseffizienz (Gitter)	%	20	–	100

* g: Erdbeschleunigung

te, der Gitterform, der Beugungseffizienz, der Herstellungsmethode und die Berücksichtigung des Einflusses ihrer Toleranzen, der Krümmung der Gitterspiegelplatte und Variationen des Gitterabstands.

Diese Eingangsparameter müssen zwingend mit den optischen Anforderungen des NIR-Spektrometers in Übereinstimmung gebracht werden, der spektralen Auflösung, der Abbildungsgenauigkeit des Spektrums, der spektralen Stabilität und dem Lichtdurchsatz wie auch der maximalen verfügbaren elektrischen Spannung und der Leistungsfähigkeit der Detektordiode im Gerät.

Als Grundlage der Entwicklung werden deshalb Zielspezifikationen festgelegt, die sich hauptsächlich an den Anforderungen der Anwendungen wie auch an Leistungsparametern von NIR-Spektrometern, die dem Stand der Technik entsprechen, orientieren. Ziel ist es, eine spektrale Auflösung des NIR-Spektrometers von 10 nm in einem Wellenlängenbereich von $900 - 2500\text{ nm}$ bei einer spektralen Stabilität von maximal 1 nm zu realisieren. Dabei soll die Lichteinkopplung in das Spektrometer über eine Multimode-Lichtfaser mit $50\text{ }\mu\text{m}$ Kerndurchmesser und einer numerischen Apertur NA von $0,22$ erfolgen. Der optische Aufbau des Spektrometers basiert auf einer Czerny-Turner-Konfiguration mit Einzeldetektor, wobei der Öffnungswinkel Θ zwischen dem einfallenden Licht auf das Gitter und dem ausfallenden, gebeugten Licht mit 15° festgelegt wird. Zielstellung ist weiterhin, dass jede Messung eines Spektrums inklusive Auswertung innerhalb von maximal 10 ms realisiert werden kann. Die von der Elektronik bereitgestellte Versorgungsspannung ist auf 36 V beschränkt. Für einen hohen Lichtdurchsatz und geringes Streulicht im NIR-Spektrometer wird eine Optimierung der Beugungsintensität des Gitters in der 1. Beugungsordnung angestrebt. Dabei sollte sie so hoch wie möglich sein, allerdings für keine Wellenlänge unter 20% liegen. Eine Zusammenfassung dieser Zielparameter findet sich in Tab. 2.4.

3 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen vorgestellt, die für die weiteren in dieser Arbeit vorgestellten Entwicklungen notwendig sind. Hierzu zählen Grundlagen des Beugungsgitters, der Czerny-Turner-Konfiguration als auch grundsätzliche Eigenschaften von einkristallinem Silizium, das als Material zur Herstellung mikromechanischer Beugungsgitter verwendet wird.

3.1 Beugung am Reflexionsgitter

Reflexionsgitter bestehen aus parallelen und äquidistant angeordneten Linien, die mit einer, für den verwendeten Wellenlängenbereich möglichst hohen, reflektierenden Schicht versehen sind [24, 44, 45]. Im NIR-Bereich kommen als Reflexionsschicht verschiedene Materialien infrage, die bekanntesten Vertreter sind Aluminium (Al), Silber (Ag) und Gold (Au) [46].

Betrachtet man eine planare Welle, die unter einem Einfallswinkel α auf das Gitter trifft, führt dies zu einer Phasenverschiebung zwischen benachbarten Teilstrahlen. Konstruktive Interferenz der Strahlen ergibt sich dann, wenn die Phasenverschiebung der Strahlen genau ein Vielfaches der Wellenlänge λ entspricht (s. Abb. 3.1). Zu beachten ist, dass die Winkel linksseitig der Gitternormalen als negativ, rechtsseitig als positiv definiert werden. Hieraus kann die allgemeine Beugungsbedingung abgeleitet werden

$$n \cdot \lambda = g \cdot (\sin \alpha + \sin \beta) \quad (3.1)$$

mit n der Beugungsordnung, λ der Wellenlänge des Lichts, g der Gitterkonstante, α dem Einfallswinkel und β dem Ausfallwinkel des gebeugten Lichts. Der Beugungsbedingung ist zu entnehmen, dass sich bei vorgegebener Gitterkonstante g und Beugungsordnung n Winkel ergeben können, für die Gl. 3.1 nicht mehr erfüllt ist. Die Beugungsordnung propagiert somit nicht mehr, wenn der Sinus des Ausfallwinkels β einen Wert $\sin \beta > 1$ annehmen müsste. Daraus lässt sich unter Verwendung von Gl. 3.1 die maximal propagierende Wellenlänge berechnen mit

$$\lambda_{max} = \left| \frac{g \cdot (\sin \alpha \pm \sin 90^\circ)}{\pm n} \right| \quad (3.2)$$

Offensichtlich sinkt die maximal propagierende Wellenlänge λ_{max} bei höheren Beugungsordnungen n . Da das NIR-Spektrometer in einem breiten Wellenlängenbereich eingesetzt werden soll (s. Tab. 2.4), ist dies der Grund für die Verwendung der 1. Beugungsordnung für die Messung, die in den Zielspezifikationen festgelegt wurde. Zusätzlich würde der freie Spektralbereich mit höheren Beugungsordnungen sinken. Verschwindet eine Beugungsordnung aus dem Spektrum, führt dies zwangsläufig zu einer neuen Aufteilung der gebeugten Lichtenergie in die verbleibenden Beugungsordnungen, da die Energieerhaltung weiterhin gegeben sein muss. Dies ist insofern

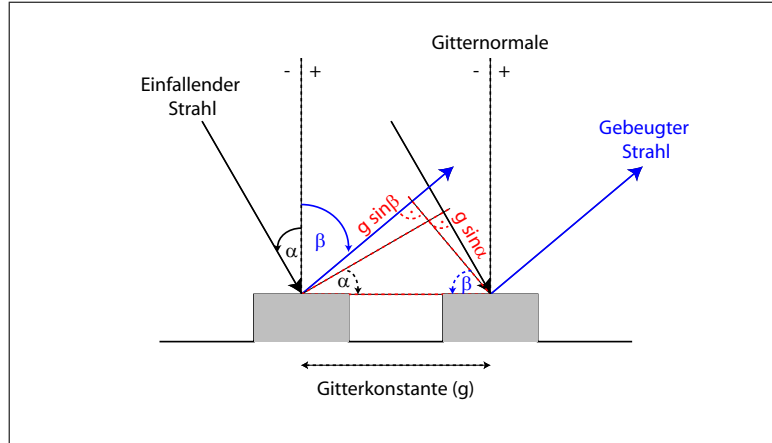


Abbildung 3.1: Beugung an einem Reflexionsgitter, basierend auf dem Phasenunterschied reflektierter Strahlen

zu beachten, da es dadurch zu Sprüngen (Peaks) in der Intensität der gemessenen 1. Beugungsordnung kommt, die die Genauigkeit der Messung empfindlich beeinflussen kann.

Eine weitere wichtige Eigenschaft ist das Auflösungsvermögen des Beugungsgitters. Es ist für eine festgelegte Wellenlänge als Winkelabstand zwischen Beugungsmaximum (Hauptmaximum) und dem ersten folgenden Minimum definiert. Betrachtet man die Intensitätsverteilung (s. Anhang Kap. 9.3) einer von einem Reflexionsgitter gebeugten monochromatischen Lichtquelle, so gilt allgemein

$$I = I_0 \cdot \frac{\sin^2 N\gamma}{\sin^2 \gamma} \quad (\text{mit } \gamma = \frac{\pi g \sin \theta}{\lambda}) \quad (3.3)$$

mit I_0 der Beugungsintensität einer Gitterlinie (z. B. einer Grube), N der Anzahl der homogen ausgeleuchteten Gitterlinien und $g \sin \theta$ dem Gangunterschied zweier benachbarter Strahlen. Für die Betrachtung des Auflösungsvermögens des Gitters spielt die Beugungsintensität einer Gitterlinie keine Rolle. Sie moduliert lediglich die Intensität des Haupt- und deren Nebenmaxima. Der Ort der Maxima und Minima der Gleichung werden durch den zweiten Faktor vorgegeben. Es ergeben sich

- Hauptmaxima, sobald $(\gamma = m\pi)$ mit $m \in \mathbb{Z}$.
Sowohl Zähler und Nenner des Faktors werden null, der Wert konvergiert zu N^2 .
- Nebenmaxima, sobald $(\gamma = \frac{p\pi}{N} + \frac{\pi}{2})$ mit $p \in [1..(N-1)]$.
- Nebenminima, sobald $(\gamma = \frac{p\pi}{N})$ mit $p \in \mathbb{Z}$.

Hieraus lässt sich der Winkelabstand zwischen Hauptmaximum und dem ersten nebenliegenden Minimum berechnen. Das winkelabhängige Auflösungsvermögen des Gitters ergibt sich somit zu

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{gN} = \frac{\lambda}{W} \quad (3.4)$$

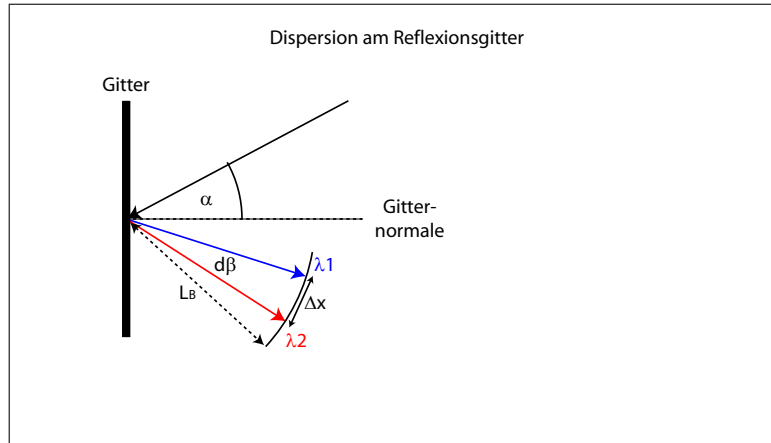


Abbildung 3.2: Winkeldispersion $\delta\beta/\delta\lambda$ bzw. lineare Dispersion $\delta x/\delta\lambda$ am Beugungsgitter

hergeleitet aus

$$\gamma = \frac{\pi}{N} = \frac{\pi g \sin \theta}{\lambda} \quad (3.5)$$

mit W der Ausdehnung der beleuchteten Gitterlinien, g der Gitterkonstante und N der Anzahl der Gitterlinien. Gleichzeitig kann auch das lineare Auflösungsvermögen bestimmt werden, das durch Projektion auf eine Fokusebene im Abstand L_B berechnet wird (s. Abb. 3.2). Hauptmaximum und nebenliegendes Minimum haben dann einen berechneten Abstand von

$$\Delta x = L_B \cdot \frac{\lambda}{W_F} = \frac{L_B \cdot \lambda}{W \cos \beta} \quad (3.6)$$

mit W_F der Ausdehnung der beleuchteten Gitterfläche, projiziert auf die Fokusebene. Die Bestimmung des Auflösungsvermögens erfolgt nach dem Rayleighkriterium. Danach können zwei Maxima unterschiedlicher Wellenlänge dann getrennt werden, wenn der Abstand der zwei Maxima nicht geringer ist als jene des einen Hauptmaximums zu seinem ersten Minimum [44].

Der wellenlängenabhängige Winkelabstand der Maxima zweier benachbarter Wellenlängen ist als Winkeldispersion eines Beugungsgitters definiert. Sie beschreibt die Fähigkeit des Beugungsgitters, Wellenlängenbereiche voneinander zu trennen (s. Abb. 3.2). Die Winkeldispersion ergibt sich durch Ableitung aus der allgemeinen Beugungsbedingung (Gl. 3.1) zu

$$\frac{\delta\beta}{\delta\lambda} = \frac{n}{g \cdot \cos \beta} \quad (3.7)$$

Auch hier lässt sich durch Projektion auf eine Fokusebene im Abstand L_B die lineare Dispersion ableiten. Es gilt somit

$$\frac{\delta x}{\delta\lambda} = \frac{n \cdot L_B}{g \cdot \cos \beta} \quad (3.8)$$

Damit ist das Rayleighkriterium gerade dann noch erfüllt, wenn die lineare Dispersion des Gitters,

als Abstand der Hauptmaxima zweier Wellenlängen, genau dem linearen Auflösungsvermögen entspricht. Hieraus lässt sich die spektrale Auflösung des Beugungsgitters mit Gl. (3.8) bestimmen zu

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = \frac{nW}{g} = nN \quad (3.9)$$

$$\left(aus \quad \frac{L_B \cdot \lambda}{W \cos \beta} = \frac{n \cdot L_B \cdot \Delta\lambda}{g \cos \beta} \right) \quad (3.10)$$

Die spektrale Auflösung des Gitters $\lambda/\Delta\lambda$ beträgt also für die 1. Beugungsordnung genau der Anzahl N der homogen beleuchteten Gitterlinien. In herkömmlichen Spektrometern liegt die spektrale Auflösung des Gitters meist deutlich über der geforderten spektralen Auflösung des Spektrometers, da die Herstellung von Reflexionsgittern mit einer Ausdehnung von mehreren Zentimetern und damit einer entsprechend hohen Gitterlinienanzahl keinen technischen Mehraufwand gegenüber kleineren Gittern bedeutet. Für mikromechanische Beugungsgitter ergibt sich allerdings durch ihre mechanischen Eigenschaften eine begrenzte Größe von wenigen Millimetern. Zudem ist einkristallines Silizium als Material kostenintensiv und der Chippreis von der Chipanzahl auf dem Wafer abhängig. Daher ist die spektrale Auflösung des Gitters bei der Dimensionierung des Spektrometers unbedingt zu berücksichtigen.

3.2 Monochromator mit Czerny-Turner-Konfiguration

Der prinzipielle Aufbau der Czerny-Turner-Konfiguration mit allen relevanten Parametern ist in Abb. 3.3 aufgezeigt. Die Fokusslänge des Parabolspiegels $P1$ ist dabei durch L_A definiert, die Fokusslänge des Parabolspiegels $P2$ durch L_B , Einfallswinkel und Ausfallswinkel jeweils durch den Winkel α bzw. β . Die Czerny-Turner-Gleichung, mit der die durch den Ausgangsspalt selektierte Wellenlänge λ berechnet wird, kann aus der allgemeinen Beugungsbedingung (Gl. 3.1) [44] hergeleitet werden (s. Kap. 9.2)

Sie ist im speziellen Fall der Czerny-Turner-Konfiguration abhängig vom Einfallswinkel α , definiert als Winkel der Gitternormalen zum einfallenden Strahl, dem festgelegten Öffnungswinkel Θ , definiert aus der Differenz zwischen Ausfallswinkel β und Einfallswinkel α , der Gitterkonstante g und der verwendeten Beugungsordnung n_B . Somit ergibt sich

$$\lambda = \frac{2g \cdot \sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha\right) \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{n_B} \quad (mit \quad \Theta = \beta - \alpha) \quad (3.11)$$

Wie in Gl. 3.11 zu sehen, ist der Zusammenhang der detektierten Wellenlänge λ zum Einfallswinkel α bzw. Ausfallswinkel β nicht linear. Deutlich sichtbar ist dies auch in der Winkeldispersion (s. Gl. 3.7) und der linearen Dispersion (s. Gl. 3.8), die bereits hergeleitet wurden. Dabei entspricht L_B hier der Fokusslänge des fokussierenden Parabolspiegels $P2$ und x der Achse parallel zur Breite des Ausgangsspalts (s. Abb. 3.3).

Zu beachten ist, dass die lineare Dispersion des Gitters durch die berücksichtigte Fokusslänge L_B nun vom Spektrometeraufbau abhängig und somit der Spektrometereigenschaften zuzuordnen

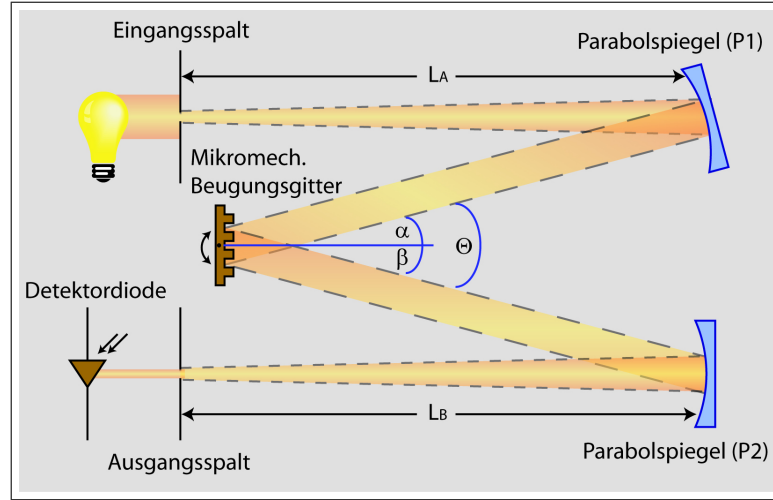


Abbildung 3.3: Wesentliche Parameter eines Czerny-Turner-Monochromators basierend auf einem beweglichen, mikromechanischen Beugungsgitter

ist. Sie ist ein signifikanter Faktor, da sie maßgeblichen Einfluss auf die erreichbare Miniaturisierung des Spektrometers hat. Zusammen mit dem Lichtdurchsatz beeinflusst sie die zentralen Eigenschaften des Spektrometers, die Auflösung und das Signal-zu-Rausch-Verhältnis.

Die Auflösung des Spektrometers ist maßgeblich von der Dispersion des Gitters und den optischen Eigenschaften des Spektrometers abhängig. Dabei ist die Auflösung umso höher, je schmäler die spektralen Anteile durch das Spektrometer abgebildet werden können. Diese Spektrometereigenschaft wird als Bandpass BP bezeichnet, und ist die Faltung zwischen dem Eingangssignal (z. B. monochromatische Lichtquelle) und der instrumentellen Linienspreizfunktion (LSF) [24].

Die instrumentelle LSF ist nur von den Spektrometereigenschaften abhängig (Spalte, Abberationen, spektrale Auflösung des Gitters) und beschreibt die Genauigkeit, mit der ein ideal schmaler spektraler Eingangspuls durch das System abgebildet werden kann. Für die Czerny-Turner-Konfiguration ist der Einfluss der Sensoreinheit vernachlässigbar, falls das detektierte Licht durch einen vorgeschalteten Ausgangsspalt definiert wird. Werden zur Kollimierung und Fokussierung parabolische Off-Axis-Spiegel verwendet, können Abberationen ebenfalls auf ein Minimum reduziert werden. Chromatische Abberationen treten durch die Verwendung von Spiegeln nicht auf, sonstige Abberationen (Defokus, Koma, Astigmatismus) zeigen sich im Idealfall (Vernachlässigung von Fertigungsfehlern der parabolischen Off-Axis-Spiegel) nur durch ungenaue Justage. Der Bandpass der Czerny-Turner-Konfiguration ist in diesem speziellen Fall eine Funktion der verwendeten Spalte und der linearen Dispersion des Gitters und kann berechnet werden zu

$$BP_{in} = \frac{g \cdot w_{in} \cdot \cos \alpha}{n \cdot L_A} \quad (3.12)$$

bzw.

$$BP_{aus} = \frac{g \cdot w_{aus} \cdot \cos \beta}{n \cdot L_B} \quad (3.13)$$

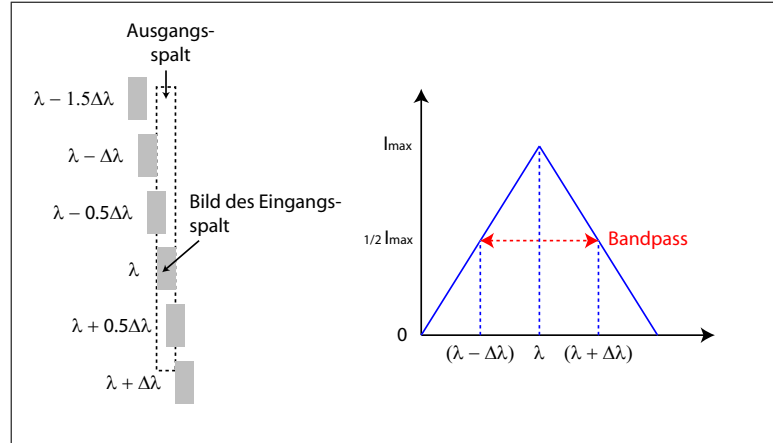


Abbildung 3.4: links: Bild des Eingangsspalts am Ort eines angepassten Ausgangsspalts für die Czerny-Turner-Konfiguration; rechts: Wellenlängenabhängige Intensitätsverteilung am Detektor für eine homogene Beleuchtung des Eingangsspalts, der Bandpass ergibt sich als Halbwertsbreite der Intensität [47]

mit w_{in} und w_{aus} den Spaltenbreiten des Eingangs- bzw. Ausgangsspalts. Dabei muss beachtet werden, dass der Einfallswinkel als auch der Ausfallswinkel im speziellen Fall der Czerny-Turner-Konfiguration wellenlängenabhängig ist. Dies gilt somit auch für den Bandpass.

Grundsätzlich dominiert im Spektrometer immer die Gleichung mit dem größeren Bandpass. Idealerweise sind beide Spalte aufeinander abgestimmt. In einem solchen Fall ist das Bild des Eingangsspaltes, das durch den optischen Strahlengang abgebildet wird, genauso groß wie der Ausgangsspalt und Gl. 3.12 / 3.13 sind folglich identisch. Wird der Eingangsspalt homogen mit Licht bestrahlt, lässt sich die Intensität, die durch den Ausgangsspalt auf den Einzeldetektor trifft als Faltung des Eingangsspalts mit dem Ausgangsspalt beschreiben. Es ergibt sich eine dreieckige Intensitätsverteilung (s. Abb. 3.4), wobei die Halbwertsbreite dem Bandpass und damit der Auflösung des Spektrometers entspricht [47]. Die hierfür benötigte ideale Breite des Ausgangsspalts lässt sich bestimmen, indem die optische Vergrößerung des Eingangsspalts am Ort des Ausgangsspalts berechnet wird. Somit gilt

$$w_{aus} = w'_{in} = w_{in} \cdot \frac{L_B \cdot \cos \alpha}{L_A \cdot \cos \beta} \quad (3.14)$$

mit w'_{in} der optischen Abbildung des Eingangsspalts am Ort des Ausgangsspalts. Wie in Gl. 3.12 / 3.13 zu sehen ist, erhöht sich die Auflösung des Systems mit Verkleinerung des Eingangs- bzw. Ausgangsspalts w_{in} , w_{aus} oder des Einfallswinkels α und Vergrößerung der Fokusslängen der Parabolspiegel L_A , L_B . Dabei ist der Einfallswinkel direkt abhängig von den Gittereigenschaften und der Wellenlänge. Für die Entwicklung eines möglichst miniaturisierten Spektrometers mit kleinen Fokusslängen L_A bzw. L_B , müssen demnach die Spalte klein gehalten werden. Dies wirkt sich allerdings negativ auf den Lichtdurchsatz aus, da ohne geeignete Sammeloptik nur eine geringe Intensität eingekoppelt werden kann.

Um den größtmöglichen Lichtdurchsatz im Spektrometer zu erhalten, sind die optischen Komponenten (Parabolspiegel und Spalte) aufeinander anzupassen. Für den Lichtdurchsatz Φ des Eingangsspalts gilt beispielsweise

$$\Phi = B \cdot G_{et} = B \cdot \pi \cdot S_{ein} \cdot (NA_{in})^2 \quad (3.15)$$

mit G_{et} dem Etendue [48], B der Beleuchtungsstärke der Lichtquelle, S_{ein} der Fläche des Eintrittspaltes und NA_{in} der numerischen Apertur der Quelle. Das Etendue bezeichnet dabei das Produkt aus Öffnungsgröße und Raumwinkel der optischen Komponenten und beschreibt die Menge an Licht, die durch das Spektrometer aufgenommen werden kann. Der Gesamtlichtdurchsatz des Spektrometers wird durch das Element mit dem kleinsten Etendue bestimmt. Idealerweise sollten die Etendues aller optischen Komponenten gleich sein. In diesem Fall ist der Lichtdurchsatz maximal und gleichzeitig das Streulicht minimiert. Nicht berücksichtigt sind hierbei Verluste durch Streuung und Absorption der einzelnen optischen Elemente.

3.3 Kristallografische Eigenschaften von Silizium

Das Basismaterial, des in dieser Arbeit entwickelten mikromechanischen Beugungsgitters, besteht aus einkristallinem Silizium. Die Herstellung erfolgt dabei durch oberflächennahe Volumenmikromechanik. Aus diesem Grund werden die für die Entwicklung relevanten kristallografischen Eigenschaften von einkristallinem Silizium im Folgenden erläutert.

Die Einheitszelle von einkristallinem Silizium besteht aus einer kubischen Diamantstruktur [49] (s. Abb. 3.5). Dabei definiert die Einheitszelle die kleinste im Kristall vorhandene Struktureinheit, die aneinandergereiht das komplette Material ausfüllt. Die Einheitszelle kann aus zwei flächenzentrierten, kubischen Würfeln konstruiert werden, die um jeweils 1/4 jeder Würfel-Kantenlänge ineinander verschoben sind (s. Abb. 3.5). Die Silizium-Atome befinden sich dabei jeweils an den Eckpunkten der Würfel und in der Mitte Ihrer Seitenflächen (kubisch flächenzentriert). Die Struktur von einkristallinem Silizium ist aufgrund der richtungsabhängigen Packungsdichte

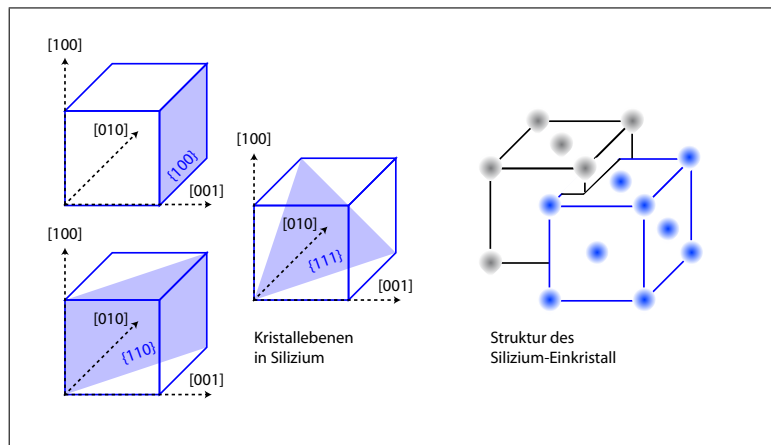


Abbildung 3.5: Bedeutende Kristallebenen im Siliziumeinkristall

Tabelle 3.1: *Eigenschaften von einkristallinem Silizium [49]*

Parameter	Einheit	{100} Ebene	{110} Ebene	{111} Ebene
Dichte*	kg/m ³	2,32 · 10 ³		
Thermische Leitfähigkeit (300 K)*	W/cmK	1,56		
Thermischer Ausdehnungskoeffizient*	1/°C	2,616 · 10 ⁻⁶		
Winkel zu {100}-Ebene (typ.)	°	90	45	54,7
Winkel zu {110}-Ebene (typ.)	°	45	90	35,3
Winkel zu {111}-Ebene (typ.)	°	54,7	35,3	70,5
Elastizitätsmodul (E)	GPa	129,5	168,0	186,5
Schubmodul (G)	GPa	79,0	61,7	57,5
Ätzrate (KOH)**	nm/min	1400	2100	3,5
Ätzrate (TMAH)**	nm/min	1000	–	20 - 80
Ätzrate (HNO ₃ und HF)**	nm/min	5000	5000	5000

* isotroper Wert

** abhängig von Konzentration und Temperatur

anisotrop. Damit sind die meisten Materialeigenschaften, die Dichte, das Ätzverhalten, das Oxidationsverhalten, die Leitfähigkeit, die mechanischen und elektrischen Eigenschaften etc. von der Orientierung des Einkristalls abhängig.

Die aus technologischer Sicht wichtigsten Kristallebenen im Silizium-Einkristall sind die {100}, {110} und {111}-Ebenen [50]. Sie bilden einen festgelegten Winkel zueinander, der durch den Kristall bestimmt ist. Für die wichtigsten Kristallebenen sind sie in Tab. 3.1 zusammengefasst. Silizium-Substrate, deren Oberfläche einer der aufgeführten Ebenen entsprechen, sind in der Mikromechanik üblich. Wie bereits erwähnt ergeben sich dadurch unterschiedliche Eigenschaften des Silizium-Materials. Dies betrifft auch die mechanischen Eigenschaften wie beispielsweise das Elastizitätsmodul und das Schubmodul (s. Tab. 3.1).

Für die technologische Umsetzung des mikromechanischen Beugungsgitters ist die ätztechnische Strukturierung des Silizium-Substrats von entscheidender Bedeutung. Während die trockenchemische Ätzung von einkristallinem Silizium eine zu vernachlässigende Abhängigkeit zur Kristallrichtung zeigt, gilt dies nicht für ausgewählte, nasschemische Bearbeitung. Die wichtigsten nasschemischen anisotropen Ätzmedien sind Kaliumhydroxid (KOH) und Tetramethylammoniumhydroxid (TMAH). Für die isotrope Ätzung wird meist eine Kombination aus Salpetersäure (HNO₃) und Flusssäure (HF) verwendet, wobei die Isotropie der Ätzung dadurch erreicht wird, dass das Silizium zunächst durch HNO₃ aufoxidiert und gleichzeitig mit Flusssäure entfernt wird.

Die anisotropen Ätzmedien zeigen eine deutliche Abhängigkeit der Ätzrate von der Kristallrichtung [51]. Für die wichtigsten Kristallebenen ist dies in Tab. 3.1 aufgezeigt. Die geringsten Ätzraten ergeben sich dabei für {111}-Ebenen. Sie sind um mindestens zwei Größenordnungen niedriger gegenüber {100}-Ebenen. Die Reduzierung der Ätzrate ist derart hoch, dass nassche-

misch anisotrop geätzte Gruben selbstständig an $\{111\}$ -Ebenen stoppen. Dadurch können sehr genaue Ätzprofile erzeugt werden, die zwar von der Kristallrichtung des Siliziums abhängen und in einer fest definierten Form der geätzten Gruben resultieren, aber nicht über eine eingebrachte Stoppschicht definiert werden müssen.

4 Design und Dimensionierung

In diesem Kapitel werden die relevanten Aspekte zum Design und der Dimensionierung des mikromechanischen Beugungsgitters betrachtet und diskutiert. Dies erfolgt unter Berücksichtigung der hergeleiteten und bereits festgelegten Zielspezifikationen für ein MEMS-basiertes miniaturisiertes NIR-Spektrometer und beinhaltet die notwendige Dimensionierung des mikromechanischen Aktors, des Beugungsgitters, des NIR-Spektrometers basierend auf der Czerny-Turner-Konfiguration als auch die Entwicklung einer geeigneten Signalbearbeitung zur Datenerfassung. Insbesondere wird hierbei auch auf die bestehenden Wechselwirkungen eingegangen, die für eine erfolgreiche Entwicklung essenziell sind.

4.1 Dimensionierung des mikromechanischen Aktuators

Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte mikromechanische Beugungsgitter zur nachfolgenden Realisierung eines miniaturisierten NIR-Spektrometers wird durch siliziumbasierte, oberflächen-nahe Volumenmikromechanik hergestellt und baut auf dem 1-dimensionalen Mikroaktor von H. Schenk [52] auf. Das mikromechanische Beugungsgitter besteht aus einer einkristallinen, beweglichen Siliziummembran, im weiteren Gitterspiegelplatte genannt, die an zwei Stellen am Rahmen des Chips an Torsionsfedern aufgehängt ist und in deren Oberfläche die beugende Struktur eingebracht ist (s. Abb. 4.1). Dabei verlaufen die parallelen, äquidistanten Linien der beugenden Struktur, im weiteren Beugungsgitter genannt, parallel zur Federaufhängung. Zur Herstellung wird ein Silicon-on-Insulator Wafermaterial (SOI) verwendet, dass aus einem einkristallinen Siliziumwafer als Trägersubstrat, einer Isolationsschicht aus Siliziumoxid SiO_2 und einer Deckschicht ebenfalls aus einkristallinem Silizium besteht. Die Dicke der Deckschicht, aus der die Gitterspiegelplatte hergestellt wird, beträgt $30\ \mu m$.

Sowohl die Gitterspiegelplatte als auch der umgebende Chiprahmen sind mit Kammelektroden versehen, die für den resonanten Antrieb des mikromechanischen Beugungsgitters genutzt werden. Die zwischenliegende Siliziumoxidschicht dient als Isolator zwischen Chiprahmen und dem unterliegenden Trägersubstrat. Gleichzeitig wird sie als ätztechnische Stoppschicht für die Freilegung der Gitterspiegelplatte im Herstellungsprozess des mikromechanischen Beugungsgitters verwendet. Auf die zur Erzeugung des mikromechanischen Beugungsgitters verwendeten Herstellungsverfahren wird in Kap. 5.3 detailliert eingegangen.

Physikalisch betrachtet entspricht das resonant angetriebene mikromechanische Beugungsgitter einem durch das Umgebungsgas gedämpften Feder-Masse-System. Bei Auslenkung der Gitterspiegelplatte werden die Torsionsfedern verdreht und erzeugen somit ein mechanisches Drehmoment M_{mech} , das die Platte zurück in Richtung ihrer Nulllage beschleunigt. Die Massenträgheit J der Gitterspiegelplatte führt folgend wieder zu einer Auslenkung über die Nulllage hinaus.

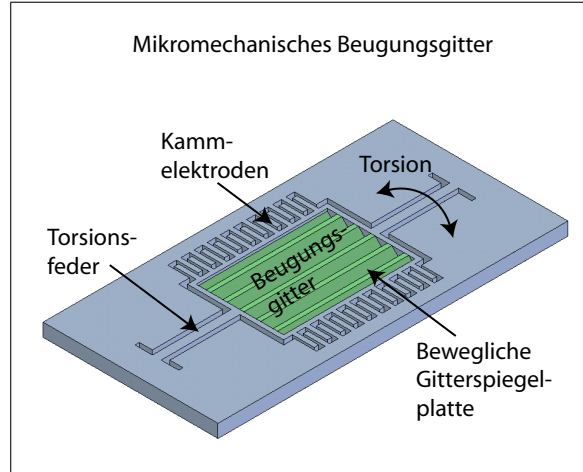


Abbildung 4.1: Aufbau des mikromechanischen Beugungsgitters mit Torsionsfeder, Gitterspiegelplatte und Kammelektroden für den Antrieb

Der Antrieb des mikromechanischen Beugungsgitters erfolgt durch Anlegen einer Spannungsdifferenz an die Kammelektroden, die im synchronisierten Fall bei maximaler Auslenkung angelegt und in der Nulllage der Gitterspiegelplatte abgeschaltet wird. Dadurch entsteht ein Krafteintrag, der bestrebt ist, den Abstand zwischen den Kammelektroden zu minimieren. So ergibt sich ein elektrostatisches Antriebsmoment M_{el} , dass die Gitterspiegelplatte in Richtung Nulllage beschleunigt.

Unter Berücksichtigung der sich bedingenden elektrischen und mechanischen Drehmomente, unter der Annahme eines zur Winkelgeschwindigkeit der Gitterspiegelplatte proportionalen Dämpfungsmoments und unter Vernachlässigung von elektrischen Randfeldern an den Kammelektroden ergibt sich die Bewegungsgleichung des mikromechanischen Beugungsgitters in erster Näherung zu

$$\frac{d}{dt^2}\Omega(t) + 2\delta\frac{d}{dt}\Omega(t) + \frac{k}{J}\Omega(t) = -\frac{M_{el}}{J} \quad (4.1)$$

mit M_{el} dem elektrostatischen Antriebsmoment, J dem Massenträgheitsmoment der Gitterspiegelplatte, Ω dem Torsionswinkel, δ der Dämpfungskonstante, in der alle Dämpfungsmomente gemittelt enthalten sind und k der Federkonstante. Beachtet werden muss, dass das elektrostatische Antriebsmoment eine Abhängigkeit zum Torsionswinkel aufweist [53]. Aus diesem Grund ist eine analytische Lösung der Differenzialgleichung nur für geringe Dämpfungen und elektrostatische Momente möglich. In diesem Fall gilt in sehr guter Näherung

$$\Omega(t) = \Omega_0 \sin(\varpi t + v) \quad (4.2)$$

mit Ω_0 der Schwingungsamplitude und ϖ der Winkelgeschwindigkeit. Die Eigenfrequenz f_0 des hier beschriebenen Feder-Masse-Systems kann folglich bestimmt werden zu

$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{J}} \quad (4.3)$$

Die Federkonstante k wird maßgeblich durch die Form und die mechanischen Eigenschaften der Feder bestimmt. Die Federgeometrie entspricht für das mikromechanische Beugungsgitter einem Balken mit rechteckiger Querschnittsfläche, mit l_f der Federlänge, b_f der Federbreite und h_f der Federhöhe. Wie in der technischen Mechanik üblich kann die Federkonstante durch die Torsionssteifigkeit C_t beschrieben werden mit

$$C_t = k \cdot l_f \quad (4.4)$$

wobei

$$C_t = G_m \cdot I_t \quad (4.5)$$

mit I_t dem Torsionsträgheitsmoment und G_m einem mittleren Schubmodul [54]. Das mittlere Schubmodul ist einzuführen, da einkristallines Silizium ein orthotroper Werkstoff ist und somit die Ausrichtung der Feder im Kristall berücksichtigt werden muss (vgl. Kap. 3.3). Das Torsionsträgheitsmoment I_t eines Balkens mit rechteckigem Querschnitt ergibt sich in sehr guter Näherung zu

$$I_t = \frac{1}{3} b_f^3 h_f \left(1 - \frac{0,63 b_f}{h_f} + \frac{0,052 b_f^5}{h_f^5} \right) \quad \text{mit } h_f \geq d_f \quad (4.6)$$

Im Fall des mikromechanischen Beugungsgitters liegt die Längsachse der Balkenfeder im Allgemeinen in [110]-Richtung des Siliziumkristalls. Die Werte des mittleren Schubmoduls G_m sind hierfür in [52] berechnet, Grenzwerte ergeben sich mit

$$G_m = 50,9 \text{ GPa} \quad \left(\frac{b_f}{h_f} \rightarrow \infty \right) \quad (4.7)$$

$$G_m = 79,6 \text{ GPa} \quad \left(\frac{b_f}{h_f} \rightarrow 0 \right) \quad (4.8)$$

Zum Antrieb des mikromechanischen Beugungsgitters wird eine gepulste Rechteckspannung U verwendet. Das elektrostatische Drehmoment M_{el} , das zur Beschleunigung der Gitterspiegelplatte in Richtung Nulllage wirkt, kann allgemein beschrieben werden mit

$$M_{el} = -\frac{1}{2} \frac{dC}{d\Omega} U^2 \quad (4.9)$$

Die Kapazität C ist dabei eine Funktion des Torsionswinkels Ω , da sich die Kammelektroden durch die Bewegung der Gitterspiegelplatte nur teilweise oder zeitweise auch gar nicht gegenüberstehen. Nach dem Durchlaufen der Nulllage und damit nach dem Ausschalten der Antriebsspannung U , schwingt die Gitterspiegelplatte mit ihrer Winkelgeschwindigkeit trägheitsbedingt weiter, wobei die Torsionsfedern kontinuierlich mechanisch verdrillt werden und somit die mechanische Rückstellkraft aufbauen. Im Umkehrpunkt ist die mechanische Rückstellkraft maximal

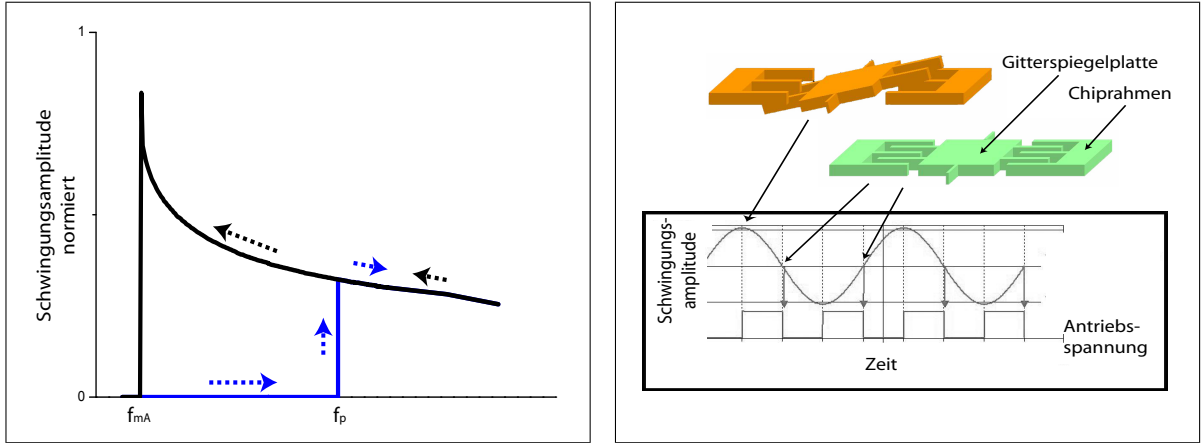


Abbildung 4.2: links: Typischer Amplitudenverlauf eines resonant betriebenen mikromechanischen Beugungsgitters in Abhängigkeit der Anregungsfrequenz f_{anr} ; rechts: Position der Gitterspiegelplatte und Schwingungsverlauf des mikromechanischen Beugungsgitters im synchronisierten Betrieb

und die Winkelgeschwindigkeit wird null. Das rücktreibende mechanische Drehmoment M_{mech} kann allgemein beschrieben werden durch

$$M_{mech} = \frac{C_t}{l_f} \cdot \Omega \quad (4.10)$$

Die dabei auftretende maximale Spannung τ_{max} in der Torsionsfeder lässt sich nach [55] berechnen durch

$$\tau_{max} = \frac{M_{mech}}{W_t} \quad (4.11)$$

mit W_t dem Torsionswiderstandsmoment. Für die hier beschriebene balkenförmige Torsionsfeder ergibt sich dieses zu

$$W_t = \frac{I_t}{h_f \cdot \left[1 - \frac{0,65}{1 + \left(\frac{h_f}{b_f} \right)^3} \right]} \quad \text{mit } h_f \geq d_f \quad (4.12)$$

Ein typischer Amplitudenverlauf eines mikromechanischen Beugungsgitters in Abhängigkeit einer Anregungsfrequenz f_{anr} ist für eine festgelegte Antriebsspannung U in Abb. 4.2 exemplarisch dargestellt. Grundsätzlich ist die dem mikromechanischen Beugungsgitter aufgezwungene Antriebsfrequenz immer doppelt so hoch wie die der eingepprägten Schwingung, da die Gitterspiegelplatte jeweils zweimal pro Schwingungsperiode angetrieben wird.

Wird die Anregungsfrequenz f_{anr} kontinuierlich erhöht, ergibt sich bis zu einer Schwingungsfrequenz f_p des mikromechanischen Beugungsgitters keine messbare Schwingungsamplitude der Gitterspiegelplatte. Sobald die Schwingungsfrequenz den Wert f_p erreicht, nimmt die Amplitude sprunghaft einen festen Wert an. Durch weiteres Erhöhen der Frequenz sinkt die Amplitude kontinuierlich bis auf null ab. Wird nun in umgekehrter Richtung die Anregungsfrequenz verringert,

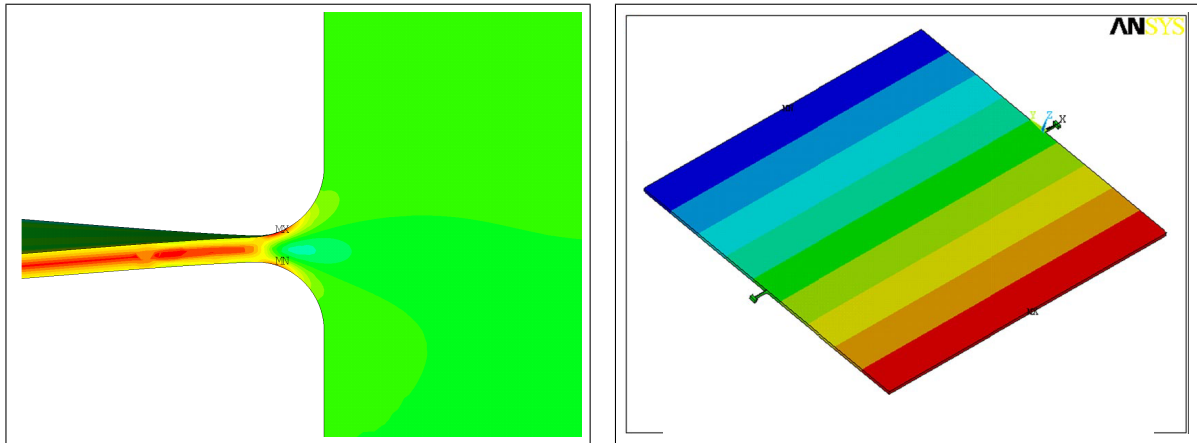


Abbildung 4.3: links: Simulation der mechanischen Scherspannung für eine Balkenfeder; rechts: Simulation einer Gitterspiegelplatte mit einer Fläche von $3 \times 3 \text{ mm}^2$

folgt die Amplitude zunächst den gleichen Amplitudenwerten bis zum Erreichen der Schwingungsfrequenz f_p . Dieser Frequenzbereich wird als parametrische Resonanz bezeichnet, da die Schwingung vergleichbar einem harmonischen Oszillator stabil ist und jederzeit gestartet werden kann.

Bei weiterer Verringerung der Anregungsfrequenz wird der Bereich der sogenannten Hysteresse erreicht, da hier die Schwingungsamplitude weiter steigt. Der Hysteresse-Bereich ist instabil. Mechanische Störungen können zu einem Zusammenbruch der Schwingung führen. Die maximale Schwingungsamplitude $\Omega_{0,max}$ stellt sich bei weiterer Verringerung bis zu einer Schwingungsfrequenz im Wert f_{mA} ein. An diesem Punkt entspricht die Anregung dem synchronisierten Antrieb des mikromechanischen Beugungsgitters, bei der die Spannung im Umkehrpunkt der Schwingung ein- und in der Nulllage der Gitterspiegelplatte ausgeschaltet wird. Wird die Anregungsfrequenz weiter gesenkt, bricht die Schwingung sprunghaft ein und verbleibt bei weiterer Verringerung auf diesem niedrigen Wert. Um das mikromechanische Beugungsgitter im Hysteresse-Bereich zu betreiben, ist somit immer ein Frequenzsweep von hohen zu niedrigen Anregungsfrequenzen f_{anr} erforderlich.

Die für eine festgelegte Antriebsspannung U erreichbare maximale Schwingungsamplitude $\Omega_{0,max}$, die äquivalent zum synchronisierten Antrieb erreicht wird, kann unter Berücksichtigung der maximal dem Feder-Masse-System zugeführten Energie ΔE angegeben werden mit

$$\Omega_{0,max} = U \cdot \sqrt{\frac{(\Delta C)}{2\pi J \varpi \delta}} \quad \text{mit } \Delta E = \Delta C \cdot U^2 \quad (4.13)$$

Die maximale Schwingungsamplitude ist somit proportional zur Antriebsspannung. Neben der Anregung der resonanten Schwingung der Gitterspiegelplatte führt der elektrostatische Antrieb über Kammelektroden auch zu einer Translation bzw. Rotation in der Chipebene. Durch symmetrische Auslegung der Kammelektroden im Entwurf addieren sich alle translatorischen und rotatorischen Kräfte zu null. Durch Asymmetrien, die bei der Herstellung der mikromechanischen Beugungsgitter nicht zu vermeiden sind, entstehen allerdings endliche Kräfte, die auf die

Gitterspiegelplatte in der Chipebene wirken. Mit einem im Ruhezustand bestimmten Elektrodenabstand der Kammstrukturen s_k kann die translatorische bzw. rotatorische Stabilitätsspannung U_T , U_R berechnet werden [54], für die der Elektrodenabstand auf einen kritischen Wert null sinkt. Es gilt unter der Annahme einer quadratischen Gitterspiegelplatte mit Breite a

$$U_T = s_k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{Eb_f^3}{\epsilon_0 a l_f^3}} \quad (4.14)$$

$$U_R = s_k^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{Eb_f (4l_f^2 + al_f + a^2) (s_k + b_{Kamm})}{3\epsilon_0 a^3 \cdot l_f^3 \cdot l_{Kamm}}} \quad (4.15)$$

mit ϵ_0 der Elektrizitätskonstante, E dem Elastizitätsmodul, b_{Kamm} und l_{Kamm} der Breite und Länge einer einzelnen Kammstruktur. Die resultierende Stabilitätsspannung U_S des mikromechanischen Beugungsgitters wird dabei durch den jeweils kleineren Wert der translatorischen bzw. rotatorischen Stabilitätsspannung vorgegeben.

Aufbauend auf den hier beschriebenen physikalischen Grundeigenschaften des mikromechanischen Beugungsgitters wurden Simulationen mit dem kommerziellen Finite-Element-Methode-Programm *ANSYS* (s. Abb. 4.3) und weiterführende Berechnungen mit *MatLab* durchgeführt [56]. Die Dimensionierung der mikromechanischen Beugungsgitter orientierte sich dabei an den Zielspezifikationen des miniaturisierten NIR-Spektrometers (vgl. Tab. 2.4).

So sollte die Gitterspiegelplatte des mikromechanischen Beugungsgitters zur Erreichung einer hohen spektralen Auflösung möglichst groß sein, eine hohe maximale Schwingungsamplitude $\Omega_{0,max}$ erzielen und aufgrund der zeitabhängigen Spektrenerfassung eine möglichst geringe Eigenfrequenz f_0 aufweisen. Für eine erwartete Messzeit eines Einzelspektrums von maximal 10 ms

Tabelle 4.1: *Designparameter optimierter, mikromechanischer Beugungsgitter mit Balkenfeder*

Parameter	Einheit	Typ 1	Typ 2
Form Gitterspiegelplatte	-	quadratisch	quadratisch
Breite Gitterspiegelplatte a	mm	3	3
Federlänge l_f	μm	84,5	117
Federbreite b_f	μm	2,6	4,5
Federhöhe h_f	μm	30,0	30,0
Eigenfrequenz f_0	Hz	150	250
Max. Schwingungsampl. $\Omega_{0,max}$ @ 36 V	°	14	12
Stabilitätsspannung U_S	V	49	44
Max. Zugspannung τ_{zug}	GPa	1,26	1,21
Max. Torsionsspannung τ_{tor}	GPa	0,68	0,93

darf sie allerdings 100 Hz nicht unterschreiten. Zur Umsetzung dieser Anforderungen wurden Ergebnisse einer ersten Machbarkeitsstudie im sichtbaren Wellenlängenbereich als Basis genutzt, wobei hier das Beugungsgitter vereinfacht durch eine linienförmig strukturierte Verspiegelungsschicht realisiert wurde [43]. Diese Spiegel wiesen eine Fläche von $2 \times 2 \text{ mm}^2$, eine minimale Resonanzfrequenz von 500 Hz und eine maximale Schwingungsamplitude von 4° auf. Um die in dieser Arbeit definierten Zielspezifikationen zu erreichen, wurden hierüber hinaus umfangreiche Optimierungen des mikromechanischen Beugungsgitters durchgeführt, die zudem die bereits beschriebenen, physikalischen Grundeigenschaften berücksichtigen.

Geeignete Designpunkte konnten bei einer Gitterfläche a^2 von $3 \times 3 \text{ mm}^2$, einer Resonanzfrequenz von 250 Hz bzw. 150 Hz und einer maximalen Schwingungsamplitude $\Omega_{0,max}$ von bis zu 14° bei einer Antriebsspannung von 36 V gefunden werden. Die Stabilitätsspannung U_S wurde auf minimal 44 V , die mechanische Spannung τ_{zug} auf maximal 1,26 GPa berechnet. Details zu diesen optimierten Designpunkten sind in Tab. 4.1 zusammengefasst. Wie im Weiteren der Arbeit noch dargestellt wird, war diese Optimierung essenziell für die Erfüllung der Zielspezifikationen des miniaturisierten NIR-Spektrometers.

4.2 Dimensionierung des Beugungsgitters

Um den aus den Zielparametern angestrebten Wellenlängenbereich zwischen 900 nm und 2500 nm spektral vermessen zu können, ist zunächst zu beachten, dass sich die verwendete +1. Beugungsordnung nicht mit höheren Beugungsordnungen überlappen darf. Nach Gl. 3.1 geschieht dies jeweils für ganzzahlige Vielfache der Wellenlänge. Somit würde sich ab einer Wellenlänge von 1800 nm die +2. Beugungsordnung ab 900 nm zur gemessenen Intensität der +1. Beugungsordnung addieren und die Messung verfälschen. Deshalb wurde der Wellenlängenbereich in geringere Abstände von 900 nm - 1800 nm bzw. 1250 nm - 2500 nm unterteilt. Automatisch ergibt sich so auch eine getrennte Gitteroptimierung, die unter Berücksichtigung der Spektrometeranforderungen durchgeführt wurde.

Im Detail müssen zur Erreichung der festgelegten Zielparameter folgende Eigenschaften des Beugungsgitters evaluiert und auch optimiert werden

- Einhaltung des Rayleighkriteriums für eine spektrale Auflösung des Beugungsgitters von mindestens 10 nm
- Festlegung des zur Messung verwendeten Winkelbereichs
- Berücksichtigung der winkelabhängigen bzw. linearen Dispersion
- Ableitung einer optimierten Gitterkonstante
- Einfluss der Streuung der Gitterkonstante auf die spektrale Auflösung und Ableitung der Grenzwerte

Um die aus Tab. 2.4 gewünschte spektrale Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers von 10 nm zu erreichen, muss neben der passenden Dimensionierung des Spektrometers primär die spektrale Auflösung des Gitters betrachtet werden, die auf dem Rayleighkriterium basiert

(vgl. Gl. 3.9). Angepasst auf die minimal zu beleuchtende Gitterlinienanzahl N_{min} ergibt sich für die zwei Wellenlängenbereiche $900 \text{ nm} - 1800 \text{ nm}$ und $1250 \text{ nm} - 2500 \text{ nm}$ damit

$$N_{min} = \frac{\lambda_{max}}{\Delta\lambda} = \frac{1800 \text{ nm}}{10 \text{ nm}} = 180 \quad (4.16)$$

bzw.

$$N_{min} = \frac{\lambda_{max}}{\Delta\lambda} = \frac{2500 \text{ nm}}{10 \text{ nm}} = 250 \quad (4.17)$$

Wie aus den Simulationsdaten ersichtlich (Tab. 4.1), wurde der mikromechanische Aktuator bis zu einer maximalen Schwingungsamplitude $\Omega_{0,max}$ von 12° bzw. 14° ausgelegt, wobei diese Grenzen hauptsächlich durch die mechanischen Belastungen (τ_{zug} , τ_{tor}) bestimmt sind. Der Winkelbereich Ω_{sp} , in dem Messwerte des Spektrums aufgenommen werden, wurde allerdings auf 9° begrenzt. Grund hierfür ist zum einen, dass ein möglichst großer Winkelbereich der Messwertaufnahme zwar zu einer größeren Auflösung führt, gleichzeitig allerdings auch der Lichtdurchsatz des Spektrometers sinkt, wie im Weiteren noch gezeigt wird. Zum anderen kann auch der Einfluss der Geschwindigkeitsänderung der Gitterspiegelplatte zur Bestimmung des Spektrums verringert werden, wenn die Messung nur einen Teil der gesamten Schwingungsamplitude nutzt und den Bereich nahe des maximalen Torsionswinkels ausschließt. Der Winkelbereich von 9° stellt somit einen optimierten Wert dieser Faktoren dar.

Bei zusätzlicher Berücksichtigung des bereits festgelegten Öffnungswinkels Θ , lässt sich iterativ die minimal zulässige Gitterkonstante g_{min} bestimmen. Durch Umstellen von Gl. 3.11 ergeben sich folgende Bedingungen, die gleichzeitig erfüllt sein müssen

$$\alpha_{min} = \arcsin \left[\frac{\lambda_{min}}{2 \cdot g_{min} \cdot \cos \left(\frac{\Theta}{2} \right)} \right] - \frac{\Theta}{2} \quad (4.18)$$

$$\alpha_{max} = \arcsin \left[\frac{\lambda_{max}}{2 \cdot g_{min} \cdot \cos \left(\frac{\Theta}{2} \right)} \right] - \frac{\Theta}{2} \quad (4.19)$$

$$\Omega_{sp} = \alpha_{max} - \alpha_{min} \quad (4.20)$$

Für die Einhaltung eines zur Messung verfügbaren Winkelbereichs Ω_{sp} von $\pm 9^\circ$ ergeben sich hieraus minimale Gitterkonstanten von 1600 nm (625 Linien/mm) für den Wellenlängenbereich von $900 \text{ nm} - 1800 \text{ nm}$ bzw. 2240 nm (446 Linien/mm) von $1250 \text{ nm} - 2500 \text{ nm}$. Berücksichtigt man zudem die Ausdehnung des Gitters von 3 mm , so liegt die Anzahl der beleuchteten Linien deutlich über der zuvor berechneten minimal benötigten spektralen Auflösung des Gitters aus Gl. 4.16 / 4.17. Eine Erhöhung der Gitterkonstante oberhalb dieser Werte ist in dieser Hinsicht folglich unkritisch.

Für die Auswahl einer geeigneten Gitterkonstante sowohl im Bereich von $900 \text{ nm} - 1800 \text{ nm}$ als auch von $1250 \text{ nm} - 2500 \text{ nm}$ muss zudem die Dispersion des Beugungsgitters betrachtet werden (vgl. Kap. 3.1). Wünschenswert ist eine möglichst hohe Dispersion, die aus Gl. 3.7 mit $1/g$

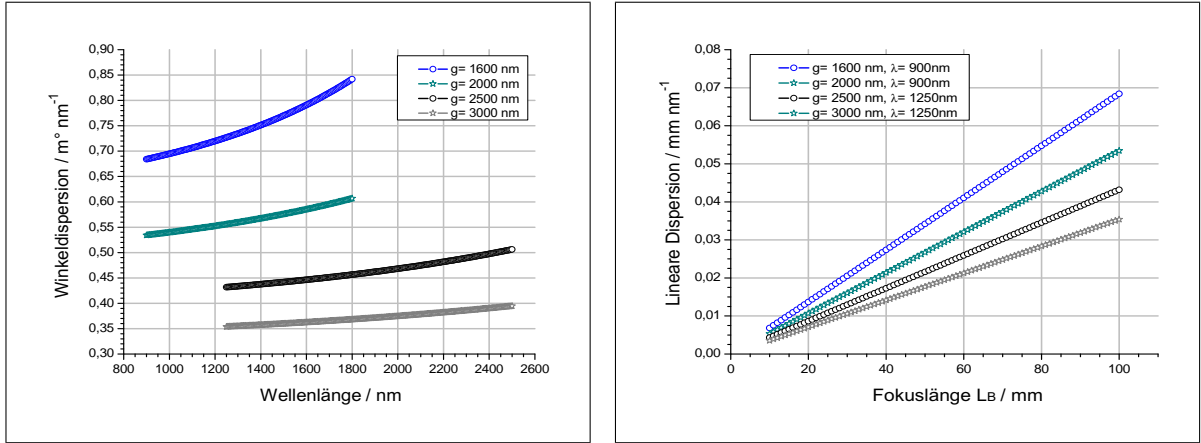


Abbildung 4.4: links: Winkeldispersion für einen Öffnungswinkel Θ von 15° bei ausgewählten Gitterkonstanten in Abhängigkeit der Wellenlänge; rechts: Lineare Dispersion für ausgewählte Gitterkonstanten in Abhängigkeit der Fokusslänge L_B

skaliert und somit durch Verringerung der Gitterkonstante ansteigt. Zur Evaluation geeigneter Gitterkonstanten wurden unter Berücksichtigung der obigen Parameter beispielhaft Gitterkonstanten von 1600 nm und 2000 nm für den niedrigen Wellenlängenbereich und Gitterkonstanten von 2500 nm und 3000 nm für den höheren Wellenlängenbereich gewählt.

Eine Übersicht der berechneten Werte ist in Abb. 4.4 dargestellt. Da die Dispersion Voraussetzung für eine hohe spektrale Auflösung des zu realisierenden NIR-Spektrometers ist, wurde für den niedrigen Wellenlängenbereich eine Gitterkonstante von 1600 nm , für den höheren von 2500 nm ausgewählt. Dabei ist die Winkeldispersion (vgl. Gl. 3.7) allein von Eigenschaften des Beugungsgitters abhängig, die lineare Dispersion kann dagegen durch L_B , der Fokusslänge des Parabolspiegels $P2$ im NIR-Spektrometer, optimiert werden (vgl. Gl. 3.8). Im rechten Graph von Abb. 4.4 ist dies für die jeweils geringste Winkeldispersion des Wellenlängenbereichs dargestellt. Steigende Werte der Fokusslänge L_B führen demnach zu einer Erhöhung der linearen Dispersion, gleichzeitig begrenzt dies allerdings die mögliche Miniaturisierung des Spektrometers.

Der Ausfallswinkel β , der im gewählten Wellenlängenbereich einer Spektrumsmessung durchlaufen wird, kann durch Umstellung der Czerny-Turner-Gleichung (Gl. 3.11) berechnet werden und ergibt sich zu

$$\beta = \arcsin \left[\frac{n \cdot \lambda}{2 \cdot g \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)} \right] + \frac{\Theta}{2} \quad (n = 1) \quad (4.21)$$

Für die Messung ist es wichtig, die notwendige Winkeländerung des Ausfallswinkels $\Delta\beta$ zu bestimmen, der zur getrennten Detektion zwei benachbarter Wellenlängen mit Abstand $\Delta\lambda$ benötigt wird. Dieser ergibt sich durch die Ableitung von Gl. 4.21 mit

$$\frac{\Delta\beta}{\Delta\lambda} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{2g \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{n}\right)^2 - \lambda^2}} \quad (n = 1) \quad (4.22)$$

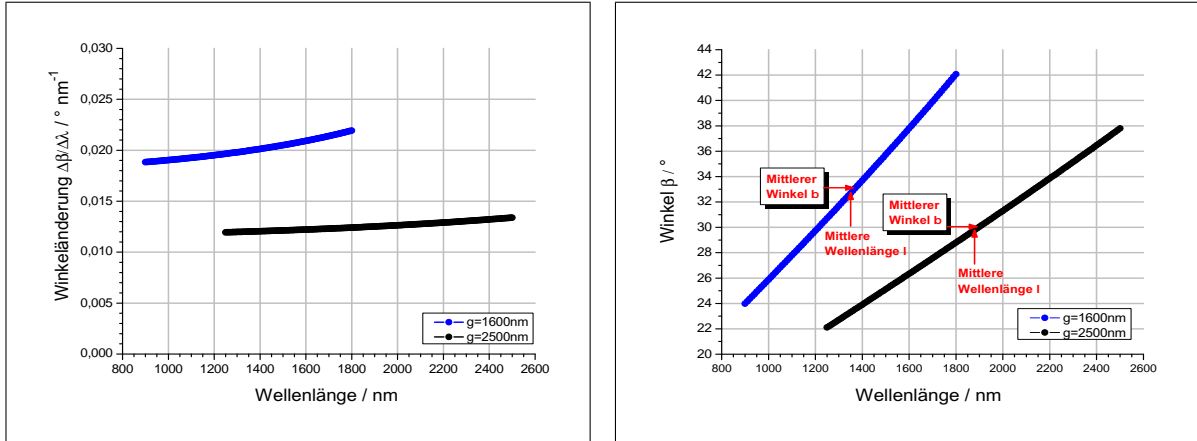


Abbildung 4.5: links: Änderung des Ausfallswinkels pro Wellenlänge $\Delta\beta/\Delta\lambda$ in Abhängigkeit der Wellenlänge bei einem Öffnungswinkel Θ von 15° ; rechts: Ausfallswinkel β in Abhängigkeit der Wellenlänge. Der mittlere Ausfallswinkel liegt nicht in der Mitte des Wellenlängenbereichs, somit wird in der Nulllage des mikromechanischen Beugungsgitters nicht die mittlere Wellenlänge gemessen.

wobei $\Delta\beta/\Delta\lambda$ nichtlinear von der Wellenlänge λ abhängig ist (s. Abb. 4.5). Die Winkeländerung wird im miniaturisierten NIR-Spektrometer durch die sinusförmige Schwingung der Gitterspiegelplatte des mikromechanischen Beugungsgitters umgesetzt. Die Schwingung verläuft dabei symmetrisch um die Nulllage mit der Schwingungsamplitude Ω_0 . Die Nulllage befindet sich damit zwar exakt im Mittelpunkt der Winkelmaxima von minimaler und maximaler Wellenlänge, aber nicht in der Mitte des zu messenden Wellenlängenbereichs (s. Abb. 4.5). So liegt die mittlere Wellenlänge für den niedrigen Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm bei 1350 nm , in der Nulllage der Gitterspiegelplatte wird allerdings eine Wellenlänge von 1370 nm detektiert. Diese Nichtlinearität ist bei der Zuordnung der Wellenlängen zum gemessenen Intensitätssignal zu beachten, auf die im weiteren dieser Arbeit noch eingegangen wird.

Aus Gl. 4.19 kann der maximale Einfallswinkel α_{max} für den festgelegten Wellenlängenbereich berechnet werden. Abgesehen von den bereits festgelegten Zielparametern, kann der maximale Einfallswinkel somit nur durch die Gitterkonstante g beeinflusst werden. Für die hier gewählten Gitterkonstanten von 1600 nm bzw. 2500 nm ergeben sich aus Gl. 3.11 maximale Einfallswinkel von $27,07^\circ$ bzw. $22,79^\circ$. Je größer der Betrag dieser Winkel ist, desto geringer der maximal zulässige Strahldurchmesser, der benötigt wird, um die Gitterfläche auszuleuchten, ohne Streulicht zu generieren (s. Abb. 4.6). Für die hier verwendeten Gitterkonstanten von 1600 nm bzw. 2500 nm verringert sich diese effektive Gitterbreite a_{eff} von 3 mm auf $2,67\text{ mm}$ bzw. $2,76\text{ mm}$. Im ungünstigsten Fall kann dies auch zu einem Intensitätsverlust im Spektrometer führen, wenn der Strahl nur durch Verringerung des Eingangsspalts ausreichend beschnitten werden kann. Es sei erwähnt, dass für diesen Parameter höhere Gitterkonstanten von Vorteil wären (vgl. Tab. 4.2), in dieser Arbeit wurde aber die spektrale Auflösung als dominierender Parameter für die Auswahl angesehen.

Eine Streuung der Gitterkonstante Δg im Herstellungsprozess ist ein weiterer Parameter, der die Messung empfindlich beeinflussen und damit stören kann. Ist die Streuung über die gesamte

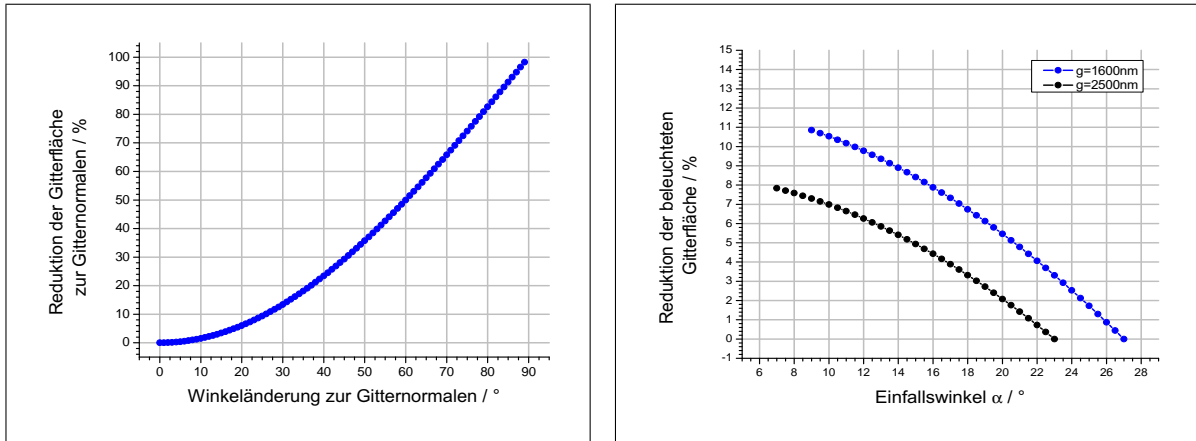


Abbildung 4.6: links: Änderung der effektiven Gitterfläche bei Drehung der Gitterspiegelplatte; rechts: Änderung der effektiven Gitterfläche bezogen auf den Einfallswinkel α im Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm und 1250 nm - 2500 nm, für den Fall, dass die Ausleuchtung der Gitterfläche auf den größten Einfallswinkel normiert ist.

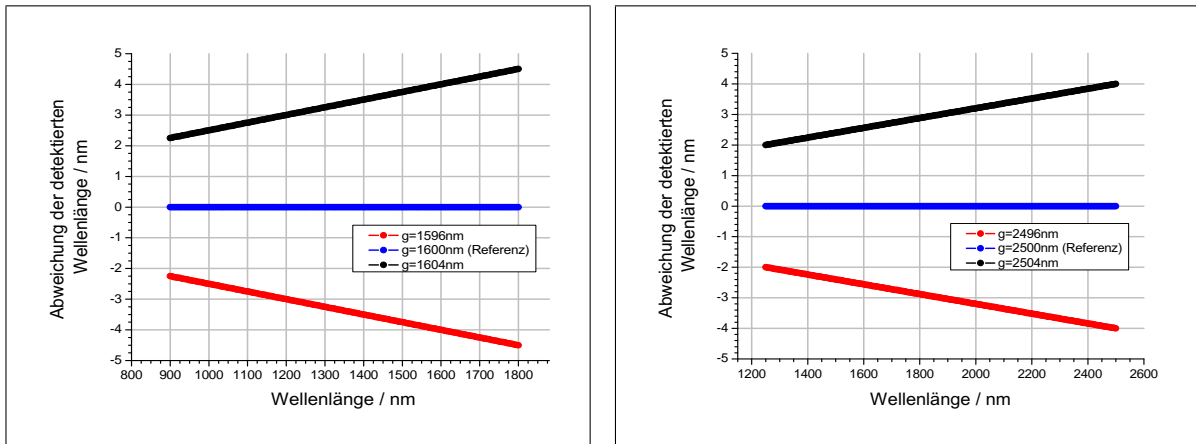


Abbildung 4.7: Relative Änderung der gemessenen Wellenlänge (Ghosts), hervorgerufen durch eine periodische Abweichung der Gitterkonstante von ± 4 nm für eine Referenzgitterkonstante g von 1600 nm (links) und 2500 nm (rechts), für einen Öffnungswinkel Θ von 15° und einem Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm (links) bzw. 1250 nm - 2500 nm (rechts)

Gitterfläche konstant, ändern sich zwar die Einfalls- und Ausfallswinkel α , β , dieser Einfluss kann jedoch durch die Kalibration des Spektrometers behoben werden. Kritischer sind periodische Änderungen der Gitterkonstante, die nur in einem begrenzten Bereich des Gitters auftreten. Man spricht dann von sogenannten „Ghosts“, Peaks im Spektrum, die aufgrund der geänderten Gitterkonstante unter falschen Einfalls- bzw. Ausfallswinkeln auftreten. Für die Messung werden sie dann relevant, wenn diese Änderung der detektierten Wellenlänge außerhalb des Rayleighkriteriums liegt, mit ± 5 nm für die aus den Zielspezifikationen abgeleitete spektrale Auflösung von 10 nm. Um die maximal zulässige Streuung der Gitterkonstante Δg zu berechnen, wird Gl. 3.11 verwendet.

Es gilt

$$\lambda_{soll} = \frac{2g_{soll} \cdot \sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha\right) \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{n} \quad (\text{mit } n = 1) \quad (4.23)$$

$$\lambda_{var} = \frac{2g_{var} \cdot \sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha\right) \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{n} \quad (\text{mit } n = 1) \quad (4.24)$$

$$\Delta g = g_{var} - g_{soll} = \frac{\lambda_{var} - \lambda_{soll}}{2 \cdot \sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha\right) \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)} \quad (\alpha = f(\lambda_{soll}, g_{soll}, \Theta)) \quad (4.25)$$

Zu beachten ist, dass der Einfallswinkel α keine unabhängige Variable ist, sondern eine Funktion des Öffnungswinkels, der Gitterkonstante und der Wellenlänge darstellt. Somit ist Gl. 4.25 nur iterativ lösbar. Für die hier gewählten Gitterkonstanten von 1600 nm bzw. 2500 nm ergibt sich eine maximal zulässige Streuung der Gitterkonstante Δg von $\pm 4,4$ nm bzw. $\pm 5,0$ nm. Dies ist insbesondere kritisch, da Veränderungen in einem derart geringen Bereich eine Herausforderung an die Herstellungstechnologie der Gitterstrukturen darstellt. Beim heutigen Stand der Technik sind selbst die genauesten Kontrollen der Gitterkonstante durch kalibrierte Messungen am Raster-Elektronen-Mikroskop (REM) nur bedingt ausreichend. Deshalb hat die Minimierung der Streuung der Gitterkonstante auch einen signifikanten Einfluss auf die Auswahl der Herstellungsmethode. Die Auswirkung der Streuung auf die gemessene Wellenlänge für beide Gitterkonstanten ist in Abb. 4.7 dargestellt. Es ist ersichtlich, dass hierbei die längste zu messende Wellenlänge dominiert. Zusammenfassend sind die in diesem Kapitel diskutierten Parameter des Beugungsgitters in Tab. 4.2 aufgelistet.

Tabelle 4.2: Berechnete Gitterparameter für ausgewählte Gitterkonstanten

Gitterkonstante		1600 nm	2000 nm	2500 nm	3000 nm
Wellenlänge (min)	nm	900	900	1250	1250
Wellenlänge (max)	nm	1800	1800	2500	2500
Min. Einfallswinkel α_{min}	°	8,98	5,62	7,11	4,63
Max. Einfallswinkel α_{max}	°	27,07	19,49	22,79	17,35
Rayleighkriterium (min.)	Linien	180	180	250	250
Anzahl Gitterlinien*	Linien	1875	1500	1200	1000
Winkeldispersion (bei λ_{min})	m°/nm	0,68	0,53	0,43	0,35
Winkeldispersion (bei λ_{max})	m°/nm	0,84	0,61	0,51	0,40
Zulässige Streuung der Gitterkonstante**	nm	$\pm 4,44$	$\pm 5,56$	$\pm 5,0$	$\pm 6,0$

* Gitterfläche von $3 \times 3 \text{ mm}^2$

** Verhinderung von störenden Ghosts

4.3 Spektrometerdesign

Die Dimensionierung der Czerny-Turner-Konfiguration (s. Abb. 3.3) für eine Integration des mikromechanischen Beugungsgitters in das System erfordert die Optimierung von mehreren Parametern, die auf den bereits festgelegten Zielparametern basieren. Im Detail müssen folgende Punkte betrachtet werden

- Dimensionierung des Parabolspiegels $P1$ zur Kollimierung des Eingangsstrahls
- Optimierung der spektralen Auflösung des Spektrometers (Bandpass) unter Berücksichtigung eines möglichen Eingangs- oder Ausgangsspalt
- Bestimmung der optischen Vergrößerung im Spektrometer durch den Parabolspiegel $P2$
- Evaluierung des effektiven Lichtdurchsatz

Hierzu gehört die Lichtfaser als Einkopplungselement, die Dimensionierung der beiden Parabolspiegel $P1$, $P2$, die Dimensionierung des Ausgangsspalts und die Wahl einer geeigneten Detektordiode. Im Vordergrund steht dabei die Sicherstellung der gewünschten spektralen Auflösung von 10 nm unter Berücksichtigung eines möglichst hohen Lichtdurchsatzes.

Um grundsätzlich einen maximalen Lichtdurchsatz zu ermöglichen, muss der Parabolspiegel $P1$ optisch so dimensioniert werden, dass das nach dem Parabolspiegel ausgehende Lichtstrahlbündel maximal die Größe der zu beleuchtenden Gitterfläche einnimmt. Zu beachten ist hierbei die durch den Einfallswinkel α reduzierte optische Fläche (s. Kap. 4.2). Die Form des Parabolspiegels folgt einer Parabel, die in y -Richtung verschoben ist. Allgemein lässt sich dies beschreiben durch

$$y = px^2 + q \quad (4.26)$$

Im Fall des NIR-Spektrometers soll $P1$ das Licht unter einem Winkel ϕ von 90° kollimieren. Das Licht wird dabei von der Lichtfaser ausgestrahlt, die vereinfacht als Punktquelle angenommen wird und eine numerische Apertur NA von $0,22$ besitzt. Weiterhin wird der Ausgang der Lichtfaser in den Ursprung des Koordinatensystems gesetzt, sodass der Mittenstrahl auf der positiven x -Achse verläuft. Durch trigonometrische Berechnungen (s. Anhang Kap. 9.4) lässt sich die Fokusslänge L_A in Abhängigkeit des Durchmessers d_p des durch $P1$ kollimierten Lichtstrahlbündels bestimmen zu

$$L_A = \frac{d_p}{\left(\tan\left(\frac{\phi + |\arcsin(NA)|}{2}\right) - \tan\left(\frac{\phi - |\arcsin(NA)|}{2}\right) \right)} \quad (4.27)$$

Unter der Annahme, dass die Breite des Lichtstrahlbündels identisch zur effektiven Breite der Gitterspiegelplatte a_{eff} ist, lässt sich die maximal zulässige Fokusslänge $L_{A,max}$ des Parabolspiegels $P1$ bestimmen. Sie ergibt sich zu $5,92\text{ mm}$ für eine Gitterkonstante von 1600 nm bzw. $6,12\text{ mm}$ für 2500 nm . Dies wäre optimal, um einen maximalen Lichtdurchsatz zu gewährleisten (s. Abb. 4.8).

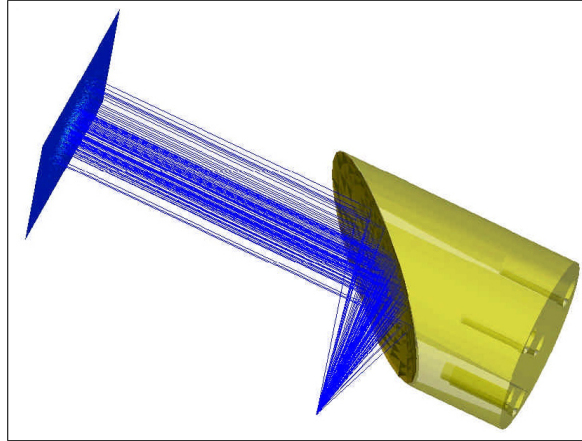


Abbildung 4.8: Strahlengang des Parabolspiegels P1 zur Kollimierung des in das miniaturisierte NIR-Spektrometer eingekoppelten Strahls unter $\phi = 90^\circ$

Die spektrale Auflösung des NIR-Spektrometers ist durch den Bandpass BP bestimmt (vgl. Kap. 3.2). Der Bandpass ist abhängig von der Breite des Eingangsspalts w_{in} , der Breite des Ausgangsspalts w_{aus} , der Gitterkonstante g , dem Einfallswinkel α , dem Ausfallswinkel β sowie von den Fokusslängen L_A und L_B der beiden Parabolspiegel P1, P2. Dabei dominiert immer der jeweils größere Wert des Bandpasses im Gesamtsystem. Idealerweise sind Eingangs- und Ausgangsspalt als auch die Fokusslängen L_A , L_B so optimiert, dass die Werte des Bandpasses möglichst nahe aneinander liegen bzw. identisch sind. Es gilt

$$BP_{in} = \frac{g \cdot w_{in} \cdot \cos \alpha}{n \cdot L_A} \quad (4.28)$$

bzw.

$$BP_{aus} = \frac{g \cdot w_{aus} \cdot \cos \beta}{n \cdot L_B} \quad (4.29)$$

Bereits festgelegt durch die Zielparameer in Tab 2.4 ist die Einkoppel-Lichtfaser mit einem Durchmesser von $50 \mu m$, die gleichzeitig als Eingangsspalt dient. Als Ausgangsspalt dient die aktive Fläche der Detektordiode, die einen Durchmesser von $300 \mu m$ aufweist. Ebenfalls festgelegt ist die Gitterkonstante mit $1600 nm$ bzw. $2500 nm$. Für die Fokusslänge L_A des Parabolspiegels P1 wurde ein Wert von $10 mm$ gewählt, obwohl sie damit deutlich über der zuvor berechneten maximalen Fokusslänge $L_{A,max}$ von $5,92 mm$ bzw. $6,12 mm$ liegt. Grund hierfür ist die Priorisierung der Erreichung des Bandpasses von $10 nm$ aus den Zielparameern, die im Weiteren erläutert wird.

Um eine ideale Ausleuchtung der Detektordiode zu erreichen, muss der Eingangsstrahl durch die Spektrometeroptik um den Faktor 6 vergrößert abgebildet werden Mag . Dies wird über eine Anpassung der Fokusslänge L_B des zweiten Parabolspiegels P2 auf $60 mm$ erreicht. Es gilt

$$Mag = \frac{f/out}{f/in} = \frac{(NA)_{in}}{(NA)_{out}} = \frac{0,5 \cdot Spotbreite \cdot L_B}{0,5 \cdot Spotbreite \cdot L_A} = \frac{60mm}{10mm} = 6 \quad (4.30)$$

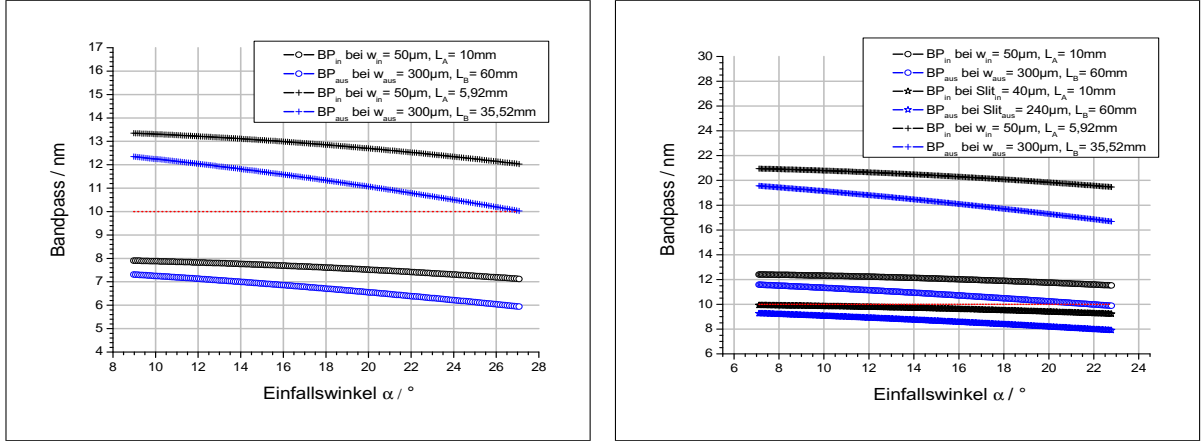


Abbildung 4.9: Berechnete, spektrale Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers (Bandpass) in Abhängigkeit des Einfallswinkels α , der Breite verschiedener Eingangs- und Ausgangsspalte und der Fokusslängen der Parabolspiegel L_A , L_B für eine Gitterkonstante von 1600 nm (links) bzw. 2500 nm (rechts)

Unter Berücksichtigung der so gewählten Fokusslängen L_A , L_B und der damit verbundenen optischen Vergrößerung des Spektrometers Mag wird ersichtlich, dass der Bandpass für eine Gitterkonstante von 1600 nm sowohl für w_{in} als auch für w_{aus} unterhalb von 10 nm liegt, mit einem Maximum bei 7,9 nm (s. Abb. 4.9). Im Gegensatz hierzu würde die Wahl einer Fokusslänge mit $L_{A,max}$ für beide Gitterkonstanten zu einem deutlich zu hohem Bandpass führen. Ebenfalls zu erkennen ist, dass die Fokusslänge und damit der Bandpass des Spektrometers für eine Gitterkonstante von 2500 nm nicht vollständig ausreicht und die angestrebten 10 nm übersteigt. Durch den Einbau eines zusätzlichen Eingangs- und Ausgangsspalts $Slit_{in}$, $Slit_{aus}$ kann dies allerdings gelöst werden. Dazu ausreichend ist eine Verringerung der ursprünglichen Spaltbreiten w_{in} , w_{aus} um 20%. Dies führt zwar zu einer Reduktion des Lichtdurchsatzes kann aber ohne grundsätzliche Veränderung des Spektrometers umgesetzt werden.

Der Lichtdurchsatz des NIR-Spektrometers, definiert als maximaler Lichtstrom, der durch die Optik des Spektrometers verarbeitet werden kann, ist von der Kombination des Eingangs- bzw. Ausgangsspalts und der beleuchteten Gitterfläche abhängig. Für eine gewählte Fokusslänge L_A von 10 mm ergibt sich ein Strahldurchmesser d_p des durch Parabolspiegel $P1$ kollimierten Lichts von 4,51 mm (vgl. Gl. 4.27). Dadurch wird der Außenbereich der Gitterspiegelplatte beleuchtet. Das entstehende Streulicht kann allerdings durch eine Blende direkt vor der Gitterspiegelplatte abgeschattet werden. Die Abmessungen der Blende orientieren sich dabei an der effektiven Breite der Gitterspiegelplatte a_{eff} (s. Kap. 4.2) von 2,67 mm für eine Gitterkonstante von 1600 nm bzw. 2,76 mm für 2500 nm. Der effektive Lichtdurchsatz lässt sich unter Berücksichtigung von Gl. 3.15 berechnen zu

$$\Phi_{eff} = B \cdot G_{et} \cdot A_{eff} = B \cdot \pi \cdot S_{ein} \cdot (NA_{in})^2 \cdot \frac{\pi \cdot \left(\frac{a_{eff}}{2}\right)^2}{\pi \cdot \left(\frac{a}{2}\right)^2} \quad (4.31)$$

$$\Phi_{eff} = B \cdot \pi \cdot S_{ein} \cdot (NA_{in})^2 \cdot \frac{a_{eff}^2}{a^2} = 299 \mu m^2 \cdot B \cdot \frac{a_{eff}^2}{a^2} \quad (4.32)$$

$$\text{mit } S_{\text{ein}} = \pi \cdot \left(\frac{50 \mu\text{m}}{2} \right)^2 \quad (4.33)$$

Unter der Annahme, dass die Beleuchtungsstärke der Lichtquelle B über die Fläche konstant ist, ergibt sich für eine Gitterkonstante von 1600 nm ein effektiver Lichtdurchsatz Φ_{eff} von $105 \mu\text{m}^2 \cdot B$. Dies bedeutet eine Reduktion des theoretisch maximal erreichbaren Lichtdurchsatzes mit $299 \mu\text{m}^2 \cdot B$ von 65%, begründet in der minimal beleuchtbaren Gitterbreite und der zu großen Fokusslänge L_A . Für eine Gitterkonstante von 2500 nm addiert sich zusätzlich der Einfluss des Eingangsspalt, der zur Erreichung des gewünschten Bandpasses einzufügen ist. Hierbei ergibt sich somit ein effektiver Lichtdurchsatz Φ_{eff} von $72 \mu\text{m}^2 \cdot B$. Dies bedeutet eine Reduktion des theoretisch maximal erreichbaren Lichtdurchsatzes von 76%. Diese Werte sind erheblich aber der Optimierung des NIR-Spektrometers hinsichtlich der spektralen Auflösung geschuldet. Nichtsdestotrotz sollte dies in einer zukünftigen Optimierungsphase des NIR-Spektrometers berücksichtigt werden. Eine Möglichkeit wäre eine weitere Flächenvergrößerung der Gitterspiegelplatte, wobei der Einfluss auf die mikromechanische Aktorik beachtet werden muss (vgl. Kap. 4.1). In Tab. 4.3 sind alle für das Spektrometer relevanten Parameter in einer Übersicht zusammengefasst.

Tabelle 4.3: Zusammenfassung der hergeleiteten Parameter für ein optimiertes Spektrometerdesign mit integriertem mikromechanischem Beugungsgitter unter Berücksichtigung der definierten Zielparame-
ter

Gitterkonstante		1600 nm	2500 nm
Numerische Apertur NA der Lichtfaser	–	0,22	0,22
Eingangsspalt w_{in} (Lichtfaser)	μm	50	50
Reduzierter Eingangsspalt $Slit_{\text{in}}$	μm	–	40
Ausgangsspalt w_{aus} (Detektordiode)	μm	300	300
Reduzierter Ausgangsspalt $Slit_{\text{aus}}$	μm	–	240
Optimierte Fokusslänge für Φ_{max} ($P1, L_{A,\text{max}}$)	mm	5,92	6,12
Optimierte Fokusslänge für Φ_{max} ($P2, L_{B,\text{max}}$)	mm	35,5	37,2
Realisierte Fokusslänge L_A	mm	10,0	10,0
Realisierte Fokusslänge L_B	mm	60,0	60,0
Optische Vergrößerung Mag	–	6,0	6,0
Max. Bandpass BP ($w_{\text{in}}, L_{A,\text{max}}$)	nm	13,4	21,0
Max. Bandpass BP ($w_{\text{aus}}, L_{B,\text{max}}$)	nm	12,4	19,6
Max. Bandpass BP (w_{in}, L_A)	nm	7,9	12,4
Max. Bandpass BP (w_{aus}, L_B)	nm	7,3	11,6
Max. Bandpass BP ($Slit_{\text{in}}, L_A$)	nm	–	9,9
Max. Bandpass BP ($Slit_{\text{aus}}, L_B$)	nm	–	9,3
Breite der Gitterspiegelplatte a	mm	3	3
Effektive Breite der Gitterspiegelplatte a_{eff}	mm	2,67	2,76
Strahldurchmesser d_p (bei L_A)	mm	4,51	4,51
Max. Lichtdurchsatz Φ_{max}	lm	$299 \mu\text{m}^2 \cdot B$	$299 \mu\text{m}^2 \cdot B$
Effektiver Lichtdurchsatz Φ_{eff}	lm	$105 \mu\text{m}^2 \cdot B$	$72 \mu\text{m}^2 \cdot B$

4.4 Signalverarbeitung zur Spektrenberechnung

Die Aufnahme eines Spektrums durch das miniaturisierte Czerny-Turner-Spektrometer erfolgt über eine zeitlich gestaffelte Messung der auf die Detektordiode eingestrahlten Lichtintensität. Die zu einem bestimmten Zeitpunkt aufgenommene Wellenlänge ist dabei direkt vom Einfallswinkel α und damit vom zeitabhängigen Torsionswinkel des mikromechanischen Beugungsgitters abhängig. Die zeitliche Aufnahme der Messpunkte muss deshalb mit der Schwingung der Gitterspiegelplatte synchronisiert werden. Zusätzlich ist durch die diskrete Abtastung der Messwerte das Abtastkriterium einzuhalten. Es besagt, dass mindestens mit der doppelten Messfrequenz abgetastet werden muss. Im Falle des miniaturisierten Spektrometers lässt sich die minimale Abtastfrequenz $f_{Ab,min}$ bestimmen durch

$$f_{Ab,min} = 2 \cdot 2 \cdot f_{mB} \cdot N_S \quad (4.34)$$

mit der Schwingungsfrequenz f_{mB} des mikromechanischen Beugungsgitters und der Anzahl der Messpunkte pro aufgenommenem Spektrum N_S , die auf 3072 gesetzt wurde. Somit ergibt sich eine mittlere Messpunktanzahl von $3,41/nm$ für den Wellenlängenbereich von $900\text{ nm} - 1800\text{ nm}$ bzw. $2,46\text{ nm}$ von $1250\text{ nm} - 2500\text{ nm}$, die für die Abtastung einer spektralen Auflösung von 10 nm ausreichend ist. Gleichzeitig ist dieser Wert ($3072 = 3\text{ kBit}$) einfach durch die Digitalelektronik des NIR-Spektrometers zu verarbeiten.

Zu beachten ist außerdem, dass die Gitterspiegelplatte während einer sinusförmigen Schwingungsperiode (s. Kap. 4.1) jeden Wellenlängenbereich zweimal durchläuft. Daher kann die Messwertaufnahme in einer halben Schwingungsperiode vollzogen werden, von $(\alpha_{min} \text{ bis } \alpha_{max})$. Die Zeit für die Rückschwingung zum Ausgangspunkt α_{min} kann somit genutzt werden, um das aufgenommene Spektrum zu berechnen. Die minimale Abtastfrequenz $f_{Ab,min}$ erhöht sich dadurch um einen weiteren Faktor 2, der in Gl. 4.34 bereits berücksichtigt worden ist. Es ergeben sich Werte von $1,84\text{ MHz}$ bei einer Schwingungsfrequenz von 150 Hz bzw. $3,07\text{ MHz}$ für 250 Hz . Da die Abtastfrequenz durch die Elektronik des Spektrometers bereitgestellt werden muss, wurde deshalb das System im Folgenden allein auf mikromechanische Beugungsgitter mit einer Frequenz von 150 Hz angepasst, um die Anforderungen dadurch zu reduzieren.

Parallel hierzu muss eine geeignete Detektordiode ausgewählt werden. Sie muss über eine Bandbreite von mindestens der Abtastfrequenz von $1,84\text{ MHz}$ verfügen und gleichzeitig im gewünschten Wellenlängenbereich von $900\text{ nm} - 1800\text{ nm}$ bzw. $1250\text{ nm} - 2500\text{ nm}$ arbeiten. Für den niederen Wellenlängenbereich wurde deshalb eine fotosensitive InGaAs-Pin-Fotodiode der Firma Hamamatsu (G8421-03) ausgewählt. Sie arbeitet im Wellenlängenbereich von 900 nm bis 1900 nm , bei einer Cut-off-Frequenz von 100 MHz und erfüllt damit die spezifischen Anforderungen.

Zur Berechnung des aufgenommenen Spektrums ist eine detaillierte Untersuchung des zeitlich aufgelösten Intensitätssignals notwendig. Wie bereits erwähnt, ist die zu einem bestimmten Zeitpunkt t detektierte Wellenlänge λ direkt vom Torsionswinkel Ω des mikromechanischen Beugungsgitters abhängig, da er den Einfallswinkel α zur Gitternormalen definiert. Damit wird der Torsionswinkel der zu bestimmende, die Schwingungsamplitude Ω_0 die zu regelnde Größe für

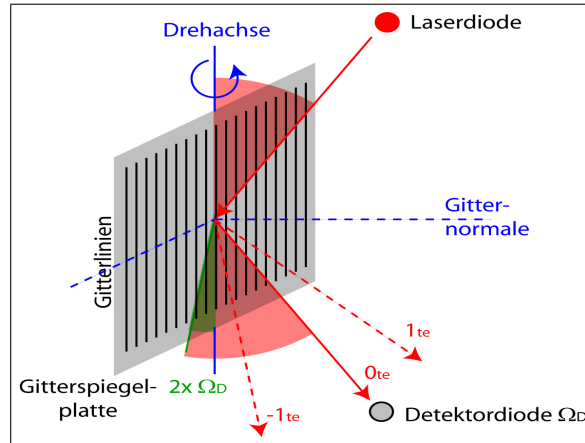


Abbildung 4.10: Prinzipskizze der Messanordnung zur Bestimmung der Schwingungsfrequenz f_{mB} und zur Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0

die spektrale Messung. Die Schwingungsamplitude kann allerdings nur mit den Eingangsgrößen des mikromechanischen Beugungsgitters beeinflusst werden, der eingepprägten Anregungsfrequenz f_{anr} bzw. der Antriebsspannung U (s. Kap. 4.1). Da diese beiden Parameter nicht voneinander unabhängig sind, wird die Schwingungsamplitude nur über die Anregungsfrequenz f_{anr} geregelt. Die Antriebsspannung U wird konstant gehalten, aber so hoch eingestellt, dass eine zur Datenerfassung festgelegte Amplitude von mindestens $\pm 9^\circ$ sicher erreicht wird.

Um die Schwingungsamplitude Ω_0 kontinuierlich konstant halten zu können, wird eine zusätzliche Laserdiode zur Amplitudenmessung verwendet. Ihr Licht fällt unter einem definierten Einfallswinkel und um 90° gedreht zum Messtrahl auf den Mittelpunkt der Gitterspiegelplatte (s. Abb. 4.10). Die Detektordiode ist so ausgerichtet, dass der durch das Beugungsgitter reflektierte Laserstrahl bei einem definierten Torsionswinkel Ω_D auf die Diode trifft. Während einer Schwingungsperiode wird dieser Winkel Ω_D zu drei Zeitpunkten T_{1-3} erreicht (s. Abb. 4.11). T_1 ist dabei jeweils der Startwert der Messung und wird deshalb standardmäßig auf 0 gesetzt. Die Schwingungsfrequenz der Gitterspiegelplatte f_{mB} lässt sich aus diesen Werten sehr einfach bestimmen und ergibt sich zu

$$f_{mB} = \frac{1}{T_3 - T_1} = \frac{1}{T_3} \quad (4.35)$$

Wie folgend gezeigt wird, ist die absolute Bestimmung der Schwingungsamplitude Ω_0 für ihre Regelung nicht notwendig. Es reicht aus, sie auf einem konstanten Wert zu halten. Der zeitabhängige Torsionswinkel $\Omega(t)$ ist gegeben durch die Schwingungsgleichung des mikromechanischen Beugungsgitters (vgl. Kap. 4.1) mit

$$\Omega(t) = \Omega_0 \cdot \sin(2\pi f_{mB} \cdot (t + t_x)) \quad (4.36)$$

Die Verschiebung der Sinusschwingung um eine Zeit t_x ist notwendig, da der Messpunkt T_1 als Referenzwert 0 gesetzt ist und die Schwingung somit zum Zeitpunkt $T_1 = 0$ bereits einen Torsionswinkel von Ω_D besitzt. Der Wert t_x muss demnach in der Gleichung durch die gemessenen

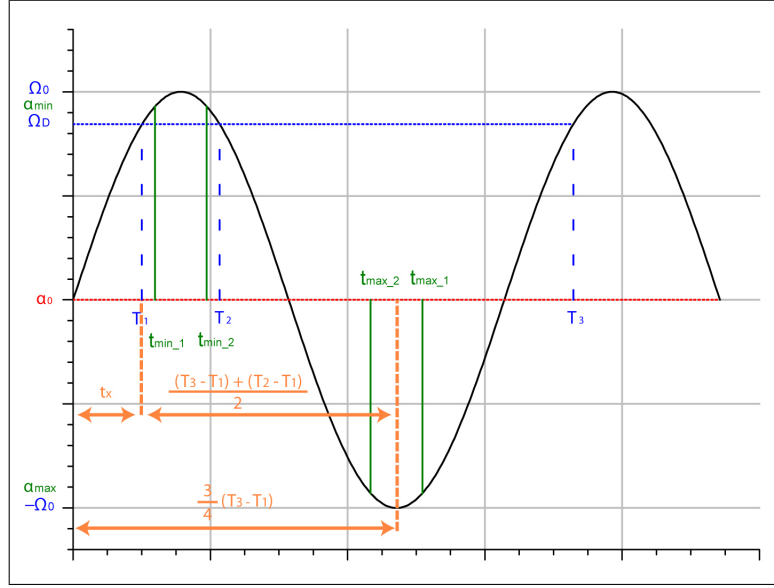


Abbildung 4.11: Parameter für die zeitabhängige Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0 des mikromechanischen Beugungsgitters

Zeitpunkte (T_2 , T_3) bestimmt werden. Wie aus Abb. 4.11 ersichtlich, ergibt sich folgender Zusammenhang

$$t_x = \frac{3}{4}(T_3 - T_1) - \frac{(T_3 - T_1) + (T_2 - T_1)}{2} \quad (T_1 \equiv 0) \quad \frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \quad (4.37)$$

Die Schwingungsgleichung aus Gl. 4.36 kann unter Verwendung von Gl. 4.37 somit beschrieben werden durch

$$\Omega(t) = \Omega_0 \cdot \sin \left(2\pi f_{mB} \cdot \left(t + \frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) \right) \quad (4.38)$$

Ersetzt man nun noch die Zeit T_3 aus Gl. 4.35 so ergibt sich

$$\Omega(t) = \Omega_0 \cdot \sin \left(2\pi f_{mB} \cdot \left(t + \frac{1}{4 \cdot f_{mB}} - \frac{1}{2}T_2 \right) \right) \quad (4.39)$$

bzw.

$$\Omega(t) = \Omega_0 \cdot \sin \left(\frac{\pi}{2} + 2\pi f_{mB} \cdot \left(t - \frac{1}{2}T_2 \right) \right) \quad (4.40)$$

Zum Messzeitpunkt T_2 ist der Torsionswinkel bekannt mit dem Wert Ω_D . Durch Einsetzen in die Schwingungsgleichung aus Gl. 4.40 erhält man somit

$$\Omega_D = \Omega_0 \cdot \sin \left(\frac{\pi}{2} + \pi \cdot f_{mB} \cdot T_2 \right) \quad (4.41)$$

Aus Gl. 4.41 ist ersichtlich, dass für eine Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0 , das Produkt $(f_{mB} \cdot T_2)$ konstant gehalten werden muss, da die Gleichung keine weiteren Variablen enthält. In diesem Fall ist Ω_0 aus Gl. 4.41 eindeutig bestimmt. Deshalb wurde dieses Produkt als Regelungsquotient R_q definiert mit

$$R_q = f_{mB} \cdot T_2 = \frac{T_2}{T_3} \quad (4.42)$$

Die Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0 über den Regelungsquotient R_q ist rein zeitabhängig und durch die Abhängigkeit der Schwingungsamplitude von der Schwingungsfrequenz f_{mB} (vgl. Abb. 4.2) bestimmt. Dies erlaubt eine einfache und schnelle Regelung im Spektrometer, da die Messzeitpunkte T_2 und T_3 direkt von der Elektronik als Messwerte erfasst werden und somit eine zeitaufwendige Umrechnung entfällt. Die Regelgröße ist die Anregungsfrequenz f_{anr} , die wie in Kap. 4.1 bereits erläutert, immer doppelt so hoch wie die eingeprägte Schwingungsfrequenz f_{mB} der Gitterspiegelplatte ist. Sie hat somit direkten Einfluss auf den Regelungsquotienten R_q . Der Aufwand für die Steuerelektronik kann dadurch auf ein Minimum reduziert werden, da die Anregungsfrequenz bereits zum Betrieb des mikromechanischen Beugungsgitters verwendet wird.

Die Aufnahme des gemessenen Spektrums erfolgt, wie bereits erwähnt, über eine zeitdiskrete Intensitätsmessung am InGaAs-Detektor. Die Messung startet dabei beim minimalen Einfallswinkel α_{min} und endet beim maximalen Einfallswinkel α_{max} . Wichtig ist dabei, die Vorzeichenkonvention des Einfallswinkels zu beachten (s. Abb. 3.1). Um alle Wellenlängen mit der zur Verfügung stehenden Schwingungsamplitude des mikromechanischen Beugungsgitters erreichen zu können, wird das mikromechanische Beugungsgitter um den mittleren Einfallswinkel α_0 verdreht eingebaut, der bestimmt ist durch

$$\alpha_0 = 0,5 \cdot (\alpha_{max} + \alpha_{min}) \quad (4.43)$$

Im einfachsten Fall befindet sich die Gitterspiegelplatte bei $t = 0$ exakt in ihrer Ruhelage α_0 . Folglich lässt sich der zu einem bestimmten Zeitpunkt bestehende Einfallswinkel $\alpha(t)$ unter Berücksichtigung von Gl. 4.38 berechnen zu

$$\alpha(t) = \Omega_0 \cdot \sin \left[2\pi f_{mB} \cdot \left(t + \frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) \right] + \alpha_0 \quad (4.44)$$

Die Messzeit t_m , die zur Aufnahme eines vollständigen Spektrums (λ_{min} bis λ_{max}) benötigt wird, lässt sich folglich aus Gl. 4.44 ableiten. Sie berechnet sich aus der Differenz des Start- bzw. Endzeitpunkts der Messung t_{min} , t_{max} unter Berücksichtigung von Gl. 4.35 zu

$$t_{min} = \frac{T_3}{2\pi} \cdot \arcsin \left(\frac{\alpha_{min} - \alpha_0}{\Omega_0} \right) - \left(\frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) \quad (4.45)$$

$$t_{max} = \frac{T_3}{2\pi} \cdot \arcsin \left(\frac{\alpha_{max} - \alpha_0}{\Omega_0} \right) - \left(\frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) \quad (4.46)$$

$$t_m = (t_{max} - t_{min}) = \frac{T_3}{2\pi} \left[\arcsin \left(\frac{\alpha_{max} - \alpha_0}{\Omega_0} \right) - \arcsin \left(\frac{\alpha_{min} - \alpha_0}{\Omega_0} \right) \right] \quad (4.47)$$

Zu beachten ist hierbei, dass die Arcsin-Funktion in Gl. 4.45 bzw. Gl. 4.46 jeweils zwei Lösungen pro Schwingungsperiode liefert ($t_{min1}, t_{min2}, t_{max1}, t_{max2}$), wie in Abb. 4.11 gezeigt. Es ist daher von maßgeblicher Bedeutung, auf die richtigen Werte zu achten. Die beiden Lösungen sind durch die sinusförmige Schwingung des mikromechanischen Beugungsgitters jedoch nicht voneinander unabhängig und lassen sich deshalb ineinander überführen durch

$$t_{min2} = T_2 - t_{min1} \quad (4.48)$$

$$t_{max1} = T_2 + T_3 - t_{max2} \quad (4.49)$$

Während der Messzeit t_m werden insgesamt 3072 Datenpunkte N_S aufgenommen. Das zeitliche Messintervall t_{mI} zwischen zwei Datenpunkten lässt sich somit berechnen zu

$$t_{mI} = \frac{t_m}{N_S} \quad (4.50)$$

Für ein mikromechanisches Beugungsgitter mit einer typischen Resonanzfrequenz von 150 Hz , einer beispielhaft gewählten Schwingungsamplitude Ω_0 von $\pm 10^\circ$ und einer Gitterkonstante von 1600 nm im Wellenlängenbereich von $900 \text{ nm} - 1800 \text{ nm}$ ergibt sich somit eine Messzeit von $2,4 \text{ ms}$. Das zeitliche Messintervall t_{mI} beträgt dabei nur $0,78 \text{ } \mu\text{s}$. Äquivalent ergibt sich für eine Gitterkonstante von 2500 nm im Wellenlängenbereich von $1250 \text{ nm} - 2500 \text{ nm}$ eine Messzeit von $1,91 \text{ ms}$ bzw. ein Messintervall von $0,62 \text{ } \mu\text{s}$. Wichtig ist in diesem Zusammenhang,

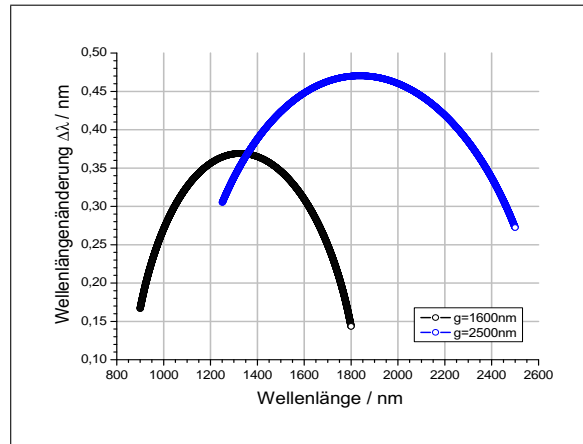


Abbildung 4.12: Wellenlängendifferenz $\Delta\lambda$ zwischen zwei Messzeitpunkten mit konstantem Messzeitintervall t_{mI} in Abhängigkeit der gemessenen Wellenlänge für eine Schwingungsamplitude Ω_0 von 10° , einer Gitterkonstante von 1600 nm bzw. 2500 nm und einer Messpunktzahl N_S von 3072

dass die hier ermittelten Werte von der Schwingungsamplitude Ω_0 abhängen, auch wenn die zur Datenaufnahme verwendete Messamplitude von $\pm 9^\circ$ unverändert bleibt. Eine Erhöhung der Schwingungsamplitude erhöht somit zwar die sichere Erreichung des zu messenden Wellenlängenbereichs, führt aber gleichzeitig zu einer Verringerung des zeitlichen Messintervalls t_{mI} .

Um abschließend den zeitlichen Zusammenhang mit der detektierten Wellenlänge λ herzustellen, und damit das zeitabhängige NIR-Spektrum berechnen zu können, muss der aus Gl. 4.44 bestimmte Einfallswinkel $\alpha(t)$ in die Beugungsbedingung des Czerny-Turner-Spektrometers (Gl. 3.11) eingesetzt werden. Man erhält den endgültigen Zusammenhang für $\lambda(t)$ mit

$$\lambda(t) = 2g \cdot \sin \left[\frac{\Theta}{2} + \left(\Omega_0 \cdot \sin \left[\frac{T_3}{2\pi} \cdot \left(t + \frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) \right] + \alpha_0 \right) \right] \cdot \cos \left(\frac{\Theta}{2} \right) \quad (4.51)$$

$$\left(\Omega_0 = \frac{\Omega_D}{\sin \left(\frac{\pi}{2} + \pi \cdot \frac{T_2}{T_3} \right)} \right) \quad (4.52)$$

Die Schwingungsamplitude Ω_0 des mikromechanischen Beugungsgitters ist folglich nicht für die Regelung der Schwingung notwendig, wohl aber für die exakte Berechnung des zeitlich aufgenommenen Spektrums. Gleichzeitig ist die kalkulierte Wellenlänge λ von sehr vielen spezifischen Gitter- bzw. Spektrometereigenschaften abhängig ($g, \Theta, \Omega_D, \alpha_0$). Deshalb muss beim Aufbau des Spektrometers sorgfältig auf die genaue Justage der einzelnen Komponenten geachtet werden, um mögliche Messfehler auf ein Minimum zu reduzieren.

Aus Gl. 4.51 wird zudem deutlich, dass kein linearer Zusammenhang zwischen der Wellenlänge λ und dem Messzeitpunkt t besteht. Dadurch variiert der Abstand der detektierten Wellenlängen $\Delta\lambda$ bei konstanten zeitlichen Messintervallen t_{mI} über das erfasste Spektrum. Der Einfluss dieser Variation auf die Messung ist für die Wellenlängenbereiche von $900 \text{ nm} - 1800 \text{ nm}$ und $1250 \text{ nm} - 2500 \text{ nm}$ in Abb. 4.12 dargestellt. Der größte Wert von $\Delta\lambda$ ergibt sich nahe der Ruhelage des mikromechanischen Beugungsgitters, dem mittleren Einfallswinkel α_0 . Grund ist die überlagerte Geschwindigkeit der Gitterspiegelplatte, die im Nulldurchgang der Schwingung ihren höchsten Wert erreicht. An den Wendepunkten ist sie dagegen null.

Da das zeitliche Messintervall t_{mI} aus Gl. 4.50 nun bekannt ist, kann jetzt die minimale Abtastfrequenz $f_{Ab,min}$ exakt bestimmt werden. Dabei wird hier berücksichtigt, dass die Messung nicht wie zuvor angenommen in einer kompletten halben Schwingungsperiode abläuft, sondern nur in einem Bruchteil davon (s. Wert von t_m). Die exakte minimale Abtastfrequenz $f_{Ab,min}$, die für die Messung benötigt wird, lässt sich dadurch einfach bestimmen mit

$$f_{Ab,min} = \frac{2}{t_{mI}} \quad (4.53)$$

Für eine Schwingungsfrequenz von 150 Hz ergibt sich somit ein deutlich erhöhter Wert von $2,57 \text{ MHz}$ für eine Gitterkonstante von 1600 nm bzw. $3,23 \text{ MHz}$ für 2500 nm . Aus den Ziel-

spezifikationen zur Spektrometerentwicklung (s. Tab. 2.4) ergibt sich unter anderem eine zu erreichende Wellenlängenstabilität λ_{Stab} von 1 nm. Sie beschreibt die maximale Streuung der gemessenen Wellenlänge zwischen mehreren nacheinander aufgenommenen Einzelspektren, um eine Mittelung zu ermöglichen und damit ein besseres Signal-zu-Rausch-Verhältnis der Messung zu erzielen. Primär ist die Wellenlängenstabilität von der Streuung des Messzeitpunktes abhängig, der den verwendeten Einfallswinkel, in Form des Torsionswinkels der Gitterspiegelplatte, festlegt. Somit lässt sich die Wellenlängenstabilität aus einer Messzeitstabilität t_{Stab} ableiten, die unter Verwendung von Gl. 4.51 hergeleitet werden kann. Es gilt

$$\lambda(t) + \lambda_{Stab} = 2g \cdot \sin \left[\frac{\Theta}{2} + \alpha(t + t_{Stab}) \right] \cdot \cos \left(\frac{\Theta}{2} \right) \quad (4.54)$$

$$\alpha(t + t_{Stab}) = \Omega_0 \cdot \sin \left[\frac{T_3}{2\pi} \cdot \left(t + t_{Stab} + \frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) \right] + \alpha_0 \quad (4.55)$$

bzw.

$$t_{Stab} = \frac{2\pi}{T_3} \cdot \arcsin \left(\frac{\arcsin \left(\frac{\lambda(t) + \lambda_{Stab}}{2g \cos \left(\frac{\Theta}{2} \right)} \right) - \frac{\Theta}{2} - \alpha_0}{\Omega_0} \right) - \left(\frac{1}{4}T_3 - \frac{1}{2}T_2 \right) - t \quad (4.56)$$

Gl. 4.56 beschreibt allgemein die notwendige Messzeitstabilität t_{Stab} , um eine gewisse Wellenlängenstabilität λ_{Stab} zu sichern. Allerdings enthält diese Formel zwei Arcsin-Funktionen, die jeweils zwei gültige Lösungen beinhalten. Die Auswahl der jeweils richtigen Lösung ist durch Plausibilitätsbetrachtungen nicht mehr möglich.

Tabelle 4.4: Zusammengefasste Parameter der Signalverarbeitung zur Spektrenberechnung

Gitterkonstante		1600 nm	2500 nm
Min. Wellenlänge des Messbereichs λ_{min}	nm	900	1250
Max. Wellenlänge des Messbereichs λ_{max}	nm	1800	2500
Messpunkte pro Spektrum N_S	–	3072	3072
Min. Abtastfrequenz $f_{Ab,min}$ *	MHz	2,57	3,23
Min. Einfallswinkel α_{min} der Messung	°	8,98	7,11
Mittlerer Einfallswinkel α_0 der Messung	°	18,025	14,95
Max. Einfallswinkel α_{max} der Messung	°	27,07	22,79
Messzeit t_m *	ms	2,4	1,91
Zeitliches Messintervall t_{mI} *	μs	0,78	0,62
Wellenlängenstabilität λ_{Stab}	nm	1,0	1,0
Messzeitstabilität t_{Stab} *	μs	2,11	1,32

* bei $\Omega_0 = \pm 10^\circ$, $\Theta = 15^\circ$, $f_{mB} = 150 \text{ Hz}$

Aus diesem Grund wird die notwendige Messzeitstabilität t_{Stab} mit einer hohen Genauigkeit abgeschätzt. Der größte Einfluss von t_{Stab} in der Messung ergibt sich exakt beim maximalen Abstand der detektierten Wellenlänge $\Delta\lambda$ pro zeitlichem Messintervall t_{mI} (vgl. Abb. 4.12). Aus dieser Überlegung lässt sich somit ableiten

$$\frac{\lambda_{Stab}}{t_{Stab}} \approx \left(\frac{\Delta\lambda}{t_{mI}} \right)_{max} \quad \text{bzw.} \quad t_{Stab} \approx \lambda_{Stab} \cdot \left(\frac{t_{mI}}{\Delta\lambda} \right)_{min} \quad (4.57)$$

Für eine gewünschte Wellenlängenstabilität von 1 nm ergibt sich unter der Berücksichtigung der Werte aus Abb. 4.12 eine notwendige Messzeitstabilität t_{Stab} von 2,11 μs für einen Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm bzw. 1,32 μs für 1250 nm - 2500 nm. Es ist deutlich erkennbar, dass dies eine enorme Anforderung an die Genauigkeit der Regelung und der Messaufnahme im zu entwickelnden NIR-Spektrometer darstellt. Eine Zusammenfassung aller für die Berechnung des Spektrums erforderlicher Parameter, die in diesem Kapitel diskutiert wurden, ist in Tab. 4.4 aufgelistet.

5 Technologieentwicklung hocheffizienter mikromechanischer Beugungsgitter

Im Folgenden wird die Entwicklung und Herstellung der mikromechanischen Beugungsgitter ausführlich erläutert. Hierzu zählt eine Evaluation der möglichen Herstellungsverfahren der Gitterstrukturen unter Berücksichtigung der technologischen Anforderungen des Herstellungsprozesses mikromechanischer Beugungsgitter. Weiterhin wird auf die Simulation der Gitterstrukturen zur Optimierung der spektralen Effizienz eingegangen, die aufbauend auf den in Kap. 4.2 abgeleiteten Designbedingungen durchgeführt wurde. Abschließend erfolgt eine Analyse des Herstellungsprozesses der mikromechanischen Beugungsgitter.

5.1 Evaluation geeigneter Technologien der Gitterherstellung

Die Herstellung von Gitterstrukturen verfügt über eine langjährige Tradition und erstreckt sich über einen Zeitraum von mehr als 50 Jahren [57]. Die Form der Gitterstrukturen ist dabei sowohl von den Möglichkeiten der Herstellungsverfahren, wie auch von den erreichbaren Beugungseffizienzen abhängig. Zu den verbreitetsten Formen gehört das Binärgitter, das aus rechteckigen Balkenstrukturen besteht, das Sinusgitter, dessen Oberfläche eine Sinusform abbildet und geblazte Gitter, die eine dreieckige Form besitzen. Während Binärgitter meist wegen der einfachen Herstellungsmöglichkeit gewählt werden, können sowohl mit Sinus- als auch mit geblazten Gittern hohe spektrale Effizienzen erreicht werden. Voraussetzung ist eine möglichst homogene Ausbildung der Form mit geringen Abweichungen, da diese empfindlichen Einfluss auf das Effizienzverhalten nimmt. Hierauf wird in den folgenden Kapiteln noch detaillierter eingegangen.

Herstellungsverfahren für Gitterstrukturen erstrecken sich über einen breiten Bereich, lassen sich aber in vier thematisch getrennte Gruppen zusammenfassen

- den mechanischen Verfahren
- der Holografie
- den seriellen Verfahren
- den abbildenden Verfahren

Zur Entwicklung der mikromechanischen Beugungsgitter ist es notwendig, diese bereits bestehenden Verfahren zu evaluieren, um eine sinnvolle Bewertung des in dieser Arbeit entwickelten Herstellungsverfahrens durchführen zu können. Dabei ist es sinnvoll, auch die grundsätzliche Integrationsfähigkeit in den Herstellungsprozess mikromechanischer Beugungsgitter zu berücksichtigen.

Als älteste und lange Zeit verbreitetste Herstellungsmethode von Gitterstrukturen zählt das mechanische Ritzverfahren, das sogenannte Ruling. Dabei werden mithilfe von Ritzwerkzeugen aus Diamant, die auf einer sich drehenden Spindel angebracht sind, äquidistante Gruben in einen Master-Rohling übertragen [45],[58]. Der Rohling ist dabei mit einer Gold- oder Aluminiumschicht überzogen, die als Reflexionsschicht dient. Typische Mastergrößen sind $40 \times 60 \text{ mm}^2$ bis $200 \times 400 \text{ mm}^2$. Mit dieser Technik können in kurzer Zeit großflächige Gitterstrukturen hergestellt werden.

Nachteilig wirkt sich für dieses Verfahren die Streuung der Gitterkonstante, der Tiefe und damit der Form der Gitterstrukturen, bedingt durch die verwendete Mechanik aus [59],[60]. Diese Abweichungen in der Gitterkonstante führen bei periodischer Wiederholung zu Ghosts, verschobene Effizienzpeaks im Spektrum, die Fehlmessungen verursachen (vgl. Kap. 4.2). Die Streuung in der Form der Gitterstrukturen führt zudem zu Inhomogenitäten der spektralen Beugungseffizienz, die vor allem bei quantitativen Analysen Messfehler verursachen können. Durch die mechanische Bearbeitung zeigen durch Ruling hergestellte Gitter eine erhöhte Rauigkeit der Gitteroberfläche, die zu zusätzlichem Streulicht führen kann.

Für die Bearbeitung von Silizium als sprödes Basismaterial der mikromechanischen Beugungsgitter eignet sich das Ruling als Verfahren nicht. Die mechanischen Belastungen können zu Rissen im Siliziumsubstrat führen, die sich entlang der Kristallstruktur leicht ausbreiten können und somit eine Zerstörung des Bauteils hervorrufen.

Die Holografie, als alternatives Herstellungsverfahren, basiert auf zwei monochromatischen, kohärenten Laserstrahlen, die unter definierten Winkeln auf einem mit fotosensitiven Lack beschichteten Master-Substrat interferieren [61]. Hieraus resultiert im Lack eine stehende Welle, die ihn sinusförmig belichtet [62]. Um diese Struktur in das Substrat zu übertragen, wird das Ionenätzen eingesetzt [63]. Dabei ist darauf zu achten, dass der Lackabtrag genauso hoch ist wie der Substratabtrag, um eine Formverzerrung der hergestellten Gitterstruktur zu verhindern. Alternativ kann das Ionenätzen auch gezielt dazu verwendet werden, das Profil so zu verändern, dass auch geblazte Gitterstrukturen hergestellt werden können [64],[65]. Typische Mastergrößen bewegen sich bis $500 \times 500 \text{ mm}^2$.

Vorteil dieses Verfahrens ist die hohe Homogenität der Gitterkonstante, die durch die Interferenz der Laserstrahlung definiert ist. Weiterhin ist es möglich, auch gekrümmte Oberflächen zu bearbeiten, wobei die Gitterstrukturierung durch eine gezielte Fokussierung der Laserstrahlen und der Einstellung des Abstandes zum Substrat bezüglich Astigmatismus und sphärischer Abberation optimiert werden kann. Nachteilig ist die notwendige Übertragung des Lackprofils durch Ionenätzen, da dadurch eine unerwünschte Verzerrung der Struktur hervorgerufen werden kann und durch den Ionenbeschuss die Rauigkeit des Substrats zunimmt. Dies führt zu Inhomogenitäten in der Beugungseffizienz sowie zu einer Erhöhung des Streulichtes.

Die Holografie ist prinzipiell kompatibel für eine Fertigung von mikromechanischen Beugungsgittern. Die Homogenität der Gitterstrukturen ist hoch, die Liniendichte durch die verwendete Wellenlänge des eingesetzten Laserlichts einstellbar. Schwierigkeiten ergeben sich bei der genauen Justage der zu strukturierenden Gitterfläche. Dies gilt sowohl für die Ausdehnung der Gitter-

strukturen wie auch für ihre Position auf dem Chip bzw. auf dem Siliziumsubstrat. Beides sind eng begrenzte Parameter, die aufgrund des Chipdesigns nur in einem niedrigen Mikrometerbereich variieren dürfen.

Zu den seriellen Verfahren der Gitterherstellung gehören das Elektronenstrahl- [66], [67], das Ionenstrahl- [68], [69] und das Laserstrahlschreiben [70]. Bei allen Verfahren wird mithilfe eines fokussierten Strahls ein auf einem Master-Substrat befindlicher fotosensitiver Lack seriell belichtet. Der Strahl rastert dabei die Fläche ab und erzeugt durch gezieltes Ein- bzw. Ausschalten ein zuvor definiertes Linienmuster. Durch die Entwicklung des Fotolacks entsteht ein binäres Gitter, dass meist durch anschließendes Ionenätzen in das Substrat übertragen wird. Durch die hohe Linienanzahl, die maßgeblich durch die Gitterkonstante und die Gittergröße vorgegeben wird, ist das Verfahren zumeist sehr zeitintensiv und aufwendig.

Der Vorteil serieller Verfahren ist in der hohen Auflösung des Schreibvorgangs im niedrigen Nanometerbereich und damit der geringen Streuung der Gitterkonstante begründet. Durch Kippung des Master-Substrates können beim nachträglichen Übertrag der Strukturen in das Substrat durch Ionenätzen auch geblazte Gitter hergestellt werden. Nachteilig wirkt sich wiederum die Substratübertragung durch Ionenätzen auf die Rauigkeit der Strukturen aus. Grundsätzlich sind serielle Verfahren für die Fertigung mikromechanischer Beugungsgitter geeignet. Die langen Schreibzeiten führen allerdings zu langen Bearbeitungszeiten, die eine effiziente Herstellung behindern.

Alle der bisher beschriebenen Verfahren zeigen einen signifikanten Aufwand bei der Herstellung der Gitterstrukturen, mechanische Verfahren und die Holografie aufgrund der anspruchsvollen Justage, serielle Verfahren wegen ihres hohen Zeitbedarfes. Aus diesem Grund werden die hergestellten Gitterstrukturen meist als Mastersubstrate für anschließende Abformungen verwendet, z. B. durch Heißprägen [71], [72]. So kann die Replikationsrate deutlich erhöht werden, allerdings ist diese Technik aufgrund der hohen Temperaturen und des Drucks nicht für eine Fertigung mikromechanischer Beugungsgitter geeignet.

In der Mikrotechnik am weitesten verbreitet sind abbildende Verfahren, die auf lithografischen Prozessen basieren. Durch die Lithografie können im einfachsten Fall Binärgitter durch reaktives Ionenätzen eines zuvor entwickelten Fotolacks in ein Substrat oder eine zuvor aufgebrachte reflektierende Schicht übertragen werden. Diese Verfahren sind somit mit seriellen Verfahren vergleichbar. Allerdings kann durch die eingesetzte Flächenbelichtung ein deutlich höherer Substratdurchsatz erreicht werden.

Durch mehrfaches Wiederholen der Belichtungs- und Ionenätzschritte können auch stufenförmige, geblazte Gitter hergestellt werden [67], [73], wobei die Qualität neben der Formtreue der Ätzung primär von der Anzahl der generierten Stufen abhängt. Die minimal erreichbare Gitterkonstante ist von der Auflösungsgenauigkeit des Belichtungssystems und des Lacks abhängig. Die Wiederholungsgenauigkeit liegt in guten Belichtungssystemen unterhalb von 50 nm. Nachteilig ist vergleichbar zu seriellen Verfahren die Aufrauung der Gitteroberfläche durch das Ionenätzen. Abgeleitete Verfahren stellen die Nano-Imprint-Lithografie [74], [75] bzw. die Verwendung von Graustufenmasken dar [76], [77].

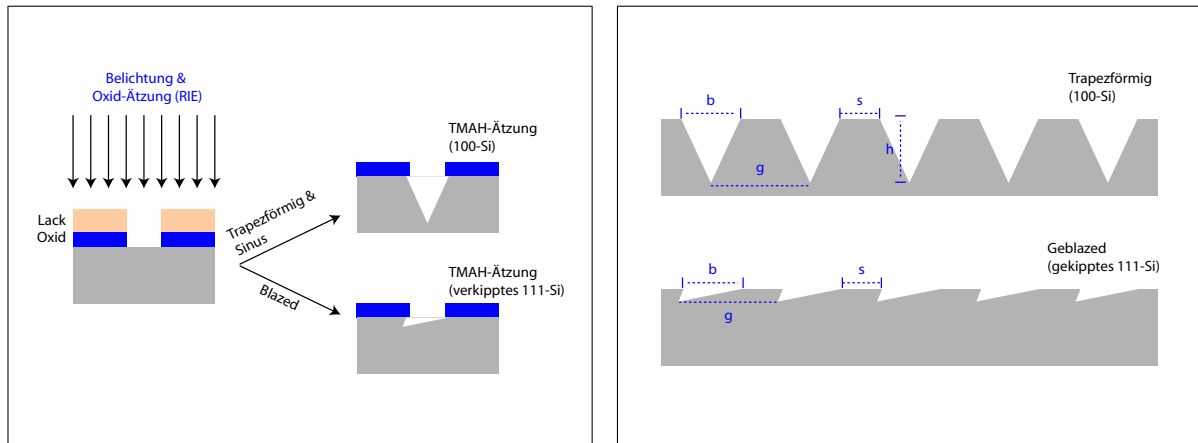


Abbildung 5.1: links: Herstellungsverfahren von trapezförmigen und gebrazten Gitterstrukturen mittels anisotroper, nasschemischer Ätzung von einkristallinem Silizium mit TMAH; rechts: Spezifische Gitterparameter

Für die Entwicklung der in dieser Arbeit vorgestellten mikromechanischen Beugungsgitter wird die Lithografie als abbildendes Verfahren gewählt. Damit werden die Vorteile hinsichtlich Auflösungs- und Wiederholgenauigkeit genutzt. Gleichzeitig wird ein bereits etabliertes Verfahren der Halbleiter- und MEMS-Fertigung eingesetzt und damit die Integrationsfähigkeit in den Herstellungsprozess sichergestellt.

Die hierfür eingesetzten Lithografiemasken werden mit einer Fertigungstoleranz von $\pm 100 \text{ nm}$ hergestellt. Dies bezieht sich auf die Kantenverschiebung der gesamten Gitterfläche. Bezogen auf die durch die Belichtungsanlage (Nikon Stepper) erzeugte Abbildung von 1:5 ergibt sich daraus sogar eine maximale Kantenverschiebung auf dem Wafer von nur $\pm 20 \text{ nm}$. Die Belichtungsanlage erreicht eine maximale Verzeichnung von $\pm 30 \text{ nm}$ auf einer Fläche von $22 \times 22 \text{ mm}^2$. Damit wird die Voraussetzung für eine größtmögliche Genauigkeit der Gittergenerierung gesichert. Gleichzeitig ist die Lithografie voll kompatibel zur verwendeten Herstellungstechnologie der mikromechanischen Beugungsgitter und kann variabel im Prozess integriert werden.

Alternativ zu ionengeätzten Gitterstrukturen, wurde in dieser Arbeit ein Verfahren entwickelt, das auf der nasschemischen, anisotropen Ätzung von einkristallinem Silizium mittels Tetramethylammoniumhydroxid (TMAH) basiert (s. Abb. 5.1). Dadurch sind sowohl trapezförmige, sinusförmige wie auch gebrazte Gitterstrukturen herstellbar, auf die in den folgenden Kapiteln noch detailliert eingegangen wird. Die Ätzrate von Silizium in TMAH ist anisotrop und damit von den Kristallebenen abhängig. Die Ätzung verlangsamt sich am Deutlichsten an $\{111\}$ -Ebenen, der Herstellungsprozess ist somit selbststoppend. Die Form der Gitterstrukturen wird grundsätzlich von der Lage der $\{111\}$ -Ebenen bestimmt, wodurch homogene Gittergruben entstehen, deren Abmessungen innerhalb einer Grube immer konstant sind. Die begrenzenden $\{111\}$ -Ebenen sind atomar glatt. Nasschemisch, anisotrope Gitterstrukturen aus Silizium sind somit in Formtreue und Rauigkeit ionengeätzten Verfahren überlegen. Gleichzeitig können mit diesem Verfahren hergestellte Gitterstrukturen direkt in das Silizium der Spiegelmembran des mikromechanischen Beugungsgitters integriert werden.

5.2 Simulation der spektralen Beugungseffizienz des Gitters

Mithilfe der Strukturierung der aus einkristallinem Silizium bestehenden Spiegelplatte des mikromechanischen Beugungsgitters lassen sich sowohl trapezförmige und sinusförmige als auch geblazte Gitter herstellen. Abhängig ist die Form der erzeugten Gitterstrukturen von der Kristallorientierung des Siliziums und der Einstellung der verwendeten Strukturierungsprozesse. Die Variation der Abmessungen innerhalb jeder Gitterstruktur ermöglicht zudem eine Optimierung hinsichtlich der erreichbaren Beugungseffizienz.

Definitionsgemäß beschreibt die spektrale Beugungseffizienz Q_n den prozentualen Anteil zwischen der Lichtintensität einer Beugungsordnung $I_{n,G}$ zur eingestrahnten Lichtintensität I_{ges} . Dabei wird in der Theorie von einem voll ausgeleuchteten und unendlich großen Gitter ausgegangen. Die simulierte Beugungseffizienz beschreibt folglich immer das theoretisch erreichbare Maximum mit

$$Q_n = \frac{I_{n,G}}{I_{ges}} \quad (5.1)$$

Zu beachten ist, dass sich Licht, definiert als elektromagnetische Welle, aus zwei polarisierten Transversalwellen zusammensetzt, einer transversal elektrischen (TE) und einer transversal magnetischen (TM), die senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Lichtes und auch selbst senkrecht zueinander stehen [44]. Für unpolarisiertes Licht, wie im Fall des in dieser Arbeit zu entwickelnden, miniaturisierten NIR-Spektrometers gültig, ergibt sich die Beugungsintensität aus dem arithmetischen Mittel der Beugungsintensitäten der einzelnen Transversalwellen (TE, TM). In der Simulation wird die Beugungseffizienz zunächst getrennt für beide Transversalwellen (TE, TM) ermittelt und hieraus die spektrale Beugungseffizienz der Beugungsordnung Q_n berechnet. Somit ergibt sich

$$Q_n(\lambda) = \frac{1}{2} \left[\frac{I_{n,G,TE}(\lambda)}{I_{ges,TE}(\lambda)} + \frac{I_{n,G,TM}(\lambda)}{I_{ges,TM}(\lambda)} \right] \quad (5.2)$$

Die Simulationen wurden mittels PCGrate [78], einem kommerziell erhältlichen Programm durchgeführt. Im Gegensatz zu anderer Simulationssoftware, die ebenfalls evaluiert wurde, bietet PCGrate die variabelsten Einstellungsmöglichkeiten. Während alle anderen Tools nur einen festen Einfallswinkel akzeptieren, lässt sich die Effizienz mit PCGrate für einen festen Öffnungswinkel Θ simulieren. In diesem Fall ist der Einfallswinkel α und der Ausfallswinkel β abhängig von der zur Berechnung gewählten Wellenlänge. Somit ist gewährleistet, dass Effizienzsimulationen für die im Betrieb des miniaturisierten Czerny-Turner-Spektrometers festgesetzten Bedingungen berechnet werden können. Hierzu zählt der Öffnungswinkel Θ mit 15° und die zuvor bereits festgelegten Gitterkonstanten von 1600 nm bzw. 2500 nm mit den Wellenlängenbereichen von $900 \text{ nm} - 1800 \text{ nm}$ und $1250 \text{ nm} - 2500 \text{ nm}$.

Um ein Optimum der Beugungseffizienz zu ermitteln, müssen zusätzlich die für eine Wellenlänge propagierenden Beugungsordnungen beachtet werden. Je mehr Beugungsordnungen vorhanden sind, desto größer der Effizienzverlust durch die Lichtintensität, die in nicht verwendete Beugungsordnungen gelenkt wird. Diese nicht genutzte Strahlung wirkt im Spektrometer als Streulicht und muss dort abgeschattet werden. Da die Direktreflexion (0. Beugungsordnung) immer

Tabelle 5.1: Berechnete Grenzwellenlänge für unterschiedliche Beugungsordnungen

Grenzwellenlänge λ_g		Gitterkonstante	Gitterkonstante
		1600 nm	2500 nm
Beugungsordnung ($n = +3$)	nm	557,5	871,5
Einfallswinkel α_g ($n = +3$)	°	2,63	2,63
Beugungsordnung ($n = +2$)	nm	933,6	1458,7
Einfallswinkel α_g ($n = +2$)	°	9,61	9,61
Beugungsordnung ($n = n_B = +1$)*	nm	3145,4	4914,8
Einfallswinkel α_g ($n = n_B = +1$)*	°	75,0	75,0
Beugungsordnung ($n = -1$)	nm	1195,6	1868,1
Einfallswinkel α_g ($n = -1$)	°	14,64	14,64
Beugungsordnung ($n = -2$)	nm	721,3	1127,1
Einfallswinkel α_g ($n = -2$)	°	5,64	5,64
Als Vergleich:			
Min. Wellenlänge λ_{min} der Messung	nm	900	1250
Min. Einfallswinkel α_{min} der Messung	°	8,98	7,11
Max. Wellenlänge λ_{max} der Messung	nm	1800	2500
Max. Einfallswinkel α_{max} der Messung	°	27,07	22,79

* Zur Messung verwendete Beugungsordnung

vorhanden ist, wäre ein Gitter mit ausschließlich der +1. Beugungsordnung, die dann zur Messung verwendet wird, am effizientesten. Die maximale Anzahl der vorhandenen Beugungsordnungen n tritt beim geringsten Einfallswinkel α_{min} und damit bei der kleinsten gemessenen Wellenlänge λ_{min} auf. Bestimmt werden kann sie aus der allgemeinen Beugungsbedingung (Gl. 3.1), die für λ_{min} erfüllt sein muss. Hieraus lässt sich ableiten

$$n_{max} = \frac{g \cdot (\sin \alpha_{min} + \sin \beta)}{\lambda_{min}} \quad (5.3)$$

oder allgemein

$$n = \frac{g \cdot (\sin \alpha + \sin \beta)}{\lambda} \quad (5.4)$$

Die Anzahl der Beugungsordnungen n ist damit abhängig von der Wellenlänge λ , dem Einfallswinkel α , dem Ausfallswinkel β und der Gitterkonstante g . Diese Parameter sind bereits im Design festgelegt worden, da sie Einfluss auf weitere entscheidende Eigenschaften des Spektrometers haben (s. Kap. 4). Zu beachten ist in diesem Zusammenhang jedoch, dass der Einfallswinkel α aus Gl. 5.4 mit der Wellenlänge variiert. Damit ist die Gleichung nicht für alle Beugungsordnungen über den gesamten gemessenen Wellenlängenbereich erfüllt. Wird die Grenzwellenlänge λ_g für eine Beugungsordnung erreicht, verschwindet sie aus dem Beugungsspektrum. Da die Energieerhaltung weiterhin gegeben sein muss, teilen sich die Intensitäten unter den verbleibenden Beugungsordnungen neu auf. Dies kann, abhängig von der Gitterstruktur, zu Effizienzsprüngen

führen, die schon bei kleinen Variationen der Spektrumsmessung und deren Kalkulation starke Schwankungen des Ergebnisses hervorrufen können. Aus diesem Grund sollten Effizienzsprünge bei der Optimierung soweit wie möglich minimiert werden. Die Grenzwellenlänge λ_g ergibt sich aus Gl. 5.4 genau dann, wenn die Sinusfunktion des Ausfallswinkels ihr Maximum erreicht ($\pm 90^\circ$). In diesem Fall gilt

$$\lambda_g = \frac{g \cdot (\sin \alpha_g + 1)}{n} \quad (\text{für } n > 0) \quad (5.5)$$

$$\lambda_g = \frac{g \cdot (\sin \alpha_g - 1)}{n} \quad (\text{für } n < 0) \quad (5.6)$$

Die Gleichungen sind für λ_g nicht explizit lösbar, da der Einfallswinkel α_g für die Czerny-Turner-Konfiguration wellenlängenabhängig ist. Allerdings muss für den Einfallswinkel α_g weiterhin die normale Beugungsbedingung der zur Messung verwendeten Beugungsordnung n_B gelten. Dies bedeutet Gl. 3.11 muss weiterhin erfüllt sein mit

$$\lambda_g = \frac{2g \cdot \sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha_g\right) \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{n_B} \quad (\Theta = \beta - \alpha_g) \quad (5.7)$$

Durch Einsetzen der Wellenlänge λ_g aus Gl. 5.5 bzw. Gl. 5.6 in Gl. 5.7 ergibt sich folglich

$$\frac{g \cdot (\sin \alpha_g \pm 1)}{n} = \frac{2g \cdot \sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha_g\right) \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)}{n_B} \quad (5.8)$$

und durch Umstellung der Gleichung abschließend

$$\sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha_g\right) = \frac{n_B \cdot (\sin \alpha_g + 1)}{2 \cdot n \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)} \quad (\text{für } n > 0) \quad (5.9)$$

$$\sin\left(\frac{\Theta}{2} + \alpha_g\right) = \frac{n_B \cdot (\sin \alpha_g - 1)}{2 \cdot n \cdot \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right)} \quad (\text{für } n < 0) \quad (5.10)$$

Für einen festgelegten Öffnungswinkel Θ kann der Einfallswinkel α_g , bei der eine Beugungsordnung n verschwindet folglich eindeutig bestimmt werden. Er ist unabhängig von der Gitterkonstante g und gilt damit für jedes beliebig gewählte Gitter. Durch Einsetzen in Gl. 5.5 bzw. Gl. 5.6 erhält man folglich die Grenzwellenlänge λ_g . Für die hier gewählten Gitter sind diese Werte in Tabelle 5.1 zusammengefasst dargestellt.

5.2.1 Effizienzsimulation trapezförmiger Gitterstrukturen

Zur Herstellung von trapezförmigen Gitterstrukturen werden SOI-Wafer mit einer {100}-orientierten Silizium-Deckschicht verwendet. So entstehen während der anisotropen Siliziumätzung mittels TMAH-Ätzung v-förmige Gruben (s. Abb. 5.1), die allein durch die kristallografischen Eigenschaften des Siliziums definiert sind (s. Kap. 3.3). Die Ätzung stoppt selbstständig an den um

mindestens zwei Größenordnungen langsamer ätzenden $\{111\}$ -Ebenen. Sie bilden untereinander einen Winkel von $70,5^\circ$. Die Gruben mit der Breite b werden durch Siliziumstege s getrennt, die zuvor mit einer Oxidmaske abgedeckt waren. Es entstehen somit trapezförmige Gitterstrukturen, deren laterale Abmessungen durch die Lithografie und die nachfolgenden Ätzschritte bestimmt sind. Die Tiefe h der Gruben ist durch die Lage der $\{111\}$ -Ebenen festgelegt und lässt sich in Abhängigkeit der Stegbreite s berechnen zu

$$h = \frac{g - s}{2 \tan\left(\frac{70,5}{2}\right)} \quad (\text{mit } b = g - s) \quad (5.11)$$

Damit ist die Stegbreite s für eine festgelegte Gitterkonstante g der einzige zur Effizienzoptimierung veränderbare Parameter. Die Optimierung erfolgt getrennt für die beiden bereits durch andere Spektrometereigenschaften festgelegten Gitterkonstanten von 1600 nm und 2500 nm .

Betrachtet wird zunächst das Beugungsgitter mit einer Gitterkonstante von 1600 nm , das für den Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm eingesetzt wird. In Abb. 5.2 ist die simulierte spektrale Beugungseffizienz für die im Spektrometer gemessene $+1$. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Wellenlänge aufgetragen. Sie setzt sich, wie bereits beschrieben aus den zwei transversalen Lichtwellen (TE, TM) zusammen (s. Abb. 5.3). Die Stegbreite s der trapezförmigen Gitterstrukturen wurde dabei im Bereich von 550 nm bis 900 nm und einer Schrittweite von 50 nm variiert.

Die maximale Beugungsintensität über den gesamten Spektralbereich lässt sich bei der geringsten Stegbreite s von 550 nm mit Werten von $34,2\%$ bis $72,1\%$ und einem Mittelwert von $48,7\%$ erreichen. Die Geringste ergibt sich gleichzeitig bei der größten gewählten Stegbreite von 900 nm mit Werten von $17,2\%$ bis $53,0\%$ und einem Mittelwert von $39,0\%$. Deutlich zu erkennen sind die Effizienzsprünge bei einer Wellenlänge von 933 nm und 1196 nm , bei der wie bereits in Kap. 5.2 beschrieben die $+2$. Beugungsordnung und -1 . Beugungsordnung verschwinden (s. Tab. 5.1). Abhängig von der Stegbreite s variiert die Stärke des Effizienzsprungs, teils von positiven bis

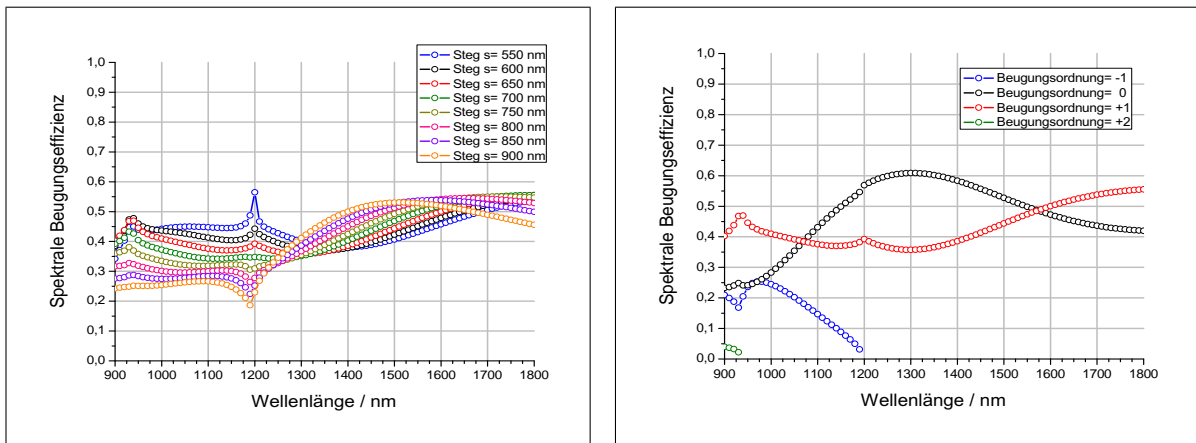


Abbildung 5.2: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm ; links: $+1$. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s ; rechts: Alle propagierenden Beugungsordnungen bei einer optimierten Stegbreite s von 650 nm

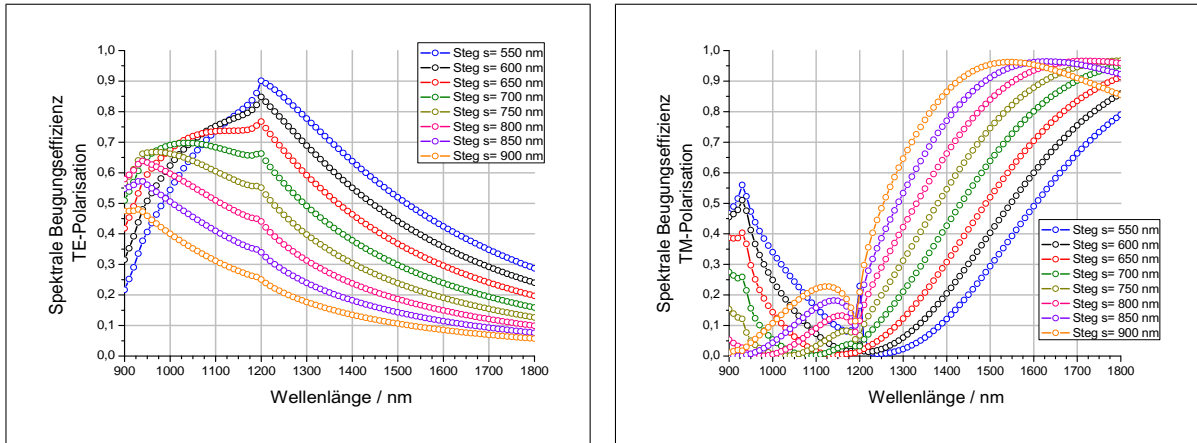


Abbildung 5.3: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; links: +1. Beugungsordnung, TE-Polarisation; rechts: +1. Beugungsordnung, TM-Polarisation

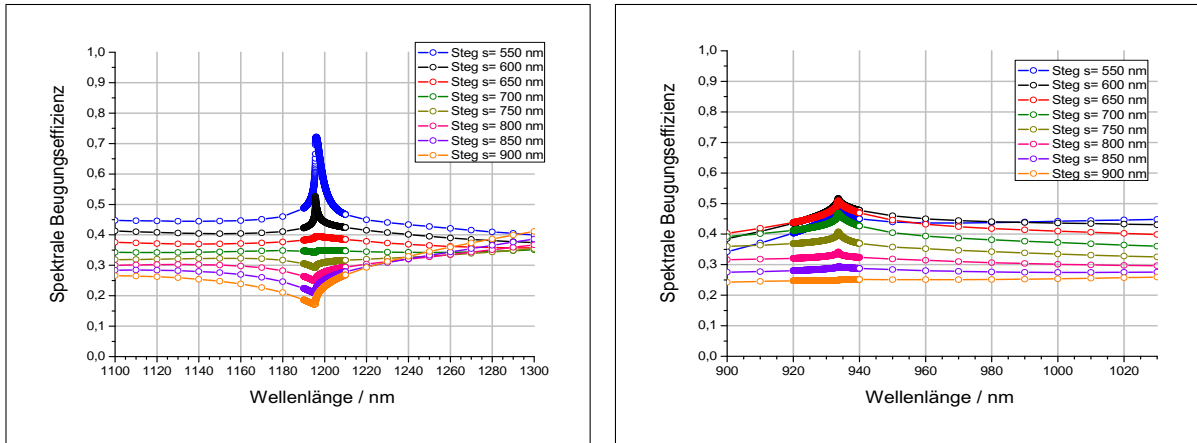


Abbildung 5.4: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; Einfluss auf die +1. Beugungsordnung bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (links) und Verschwinden der +2. Beugungsordnung (rechts)

zu negativen Werten (s. Abb. 5.4). Das Optimum der Beugungsintensität wurde deshalb auf eine Stegbreite von 650 nm festgelegt, da hier eine möglichst hohe Intensität über den gesamten Spektralbereich erreicht und gleichzeitig der Effizienzsprung auf ein Minimum reduziert werden kann. Die Effizienzwerte liegen dabei in einem Bereich von 35,7% bis 55,8% und einem Mittelwert von 47,7%.

Die Verteilung der Lichtintensität auf die restlichen Beugungsordnungen ist in Abb. 5.2 dargestellt. Deutlich wird, dass die Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung dann ansteigt, wenn die Anzahl der restlichen Beugungsordnungen auf ein Minimum begrenzt ist. Da dies ausschließlich durch eine Reduzierung der Gitterkonstante g erzielt werden kann (s. Gl. 5.3), sollte dies für weitere Optimierungen in der Zukunft berücksichtigt werden. Wird beispielsweise die Gitterkon-

stante auf 1000 nm bei Beibehaltung des Verhältnisses von Stegbreite zu Gitterkonstante von 650 nm zu 1600 nm reduziert (s. Abb. 5.8), erhöht sich die erreichbare spektrale Effizienz der +1. Beugungsordnung auf Werte von 37,3% bis 55,0% und einem Mittelwert von 50,8%. Wie in Kap. 4 ausführlich erläutert, verlangt dies unter Anderem eine Erhöhung der Schwingungsamplitude Ω_0 des mikromechanischen Beugungsgitters, wobei gleichzeitig der maximal erreichbare Lichtdurchsatz reduziert wird.

Für das Beugungsgitter mit einer Gitterkonstante von 2500 nm, im Design festgelegt für einen Wellenlängenbereich von 1250 nm - 2500 nm, wurden zur Effizienzoptimierung Simulationen mit einer variierenden Stegbreite s von 800 nm bis 1400 nm und einer Schrittweite von 100 nm durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.5/5.6 dargestellt. Die maximale Beugungseffizienz

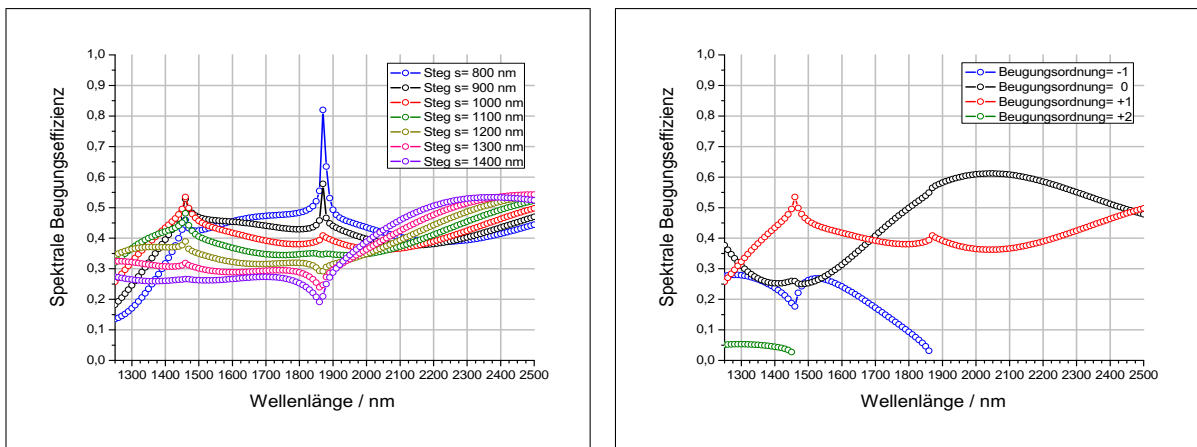


Abbildung 5.5: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm; links: +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s ; rechts: Alle propagierenden Beugungsordnungen bei einer optimierten Stegbreite s von 1000 nm

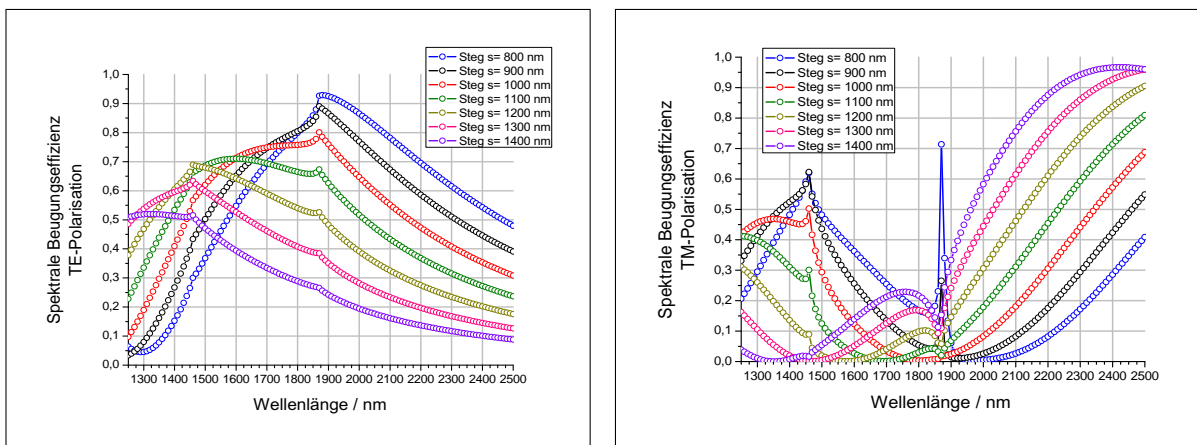


Abbildung 5.6: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; links: +1. Beugungsordnung, TE-Polarisation; rechts: +1. Beugungsordnung, TM-Polarisation

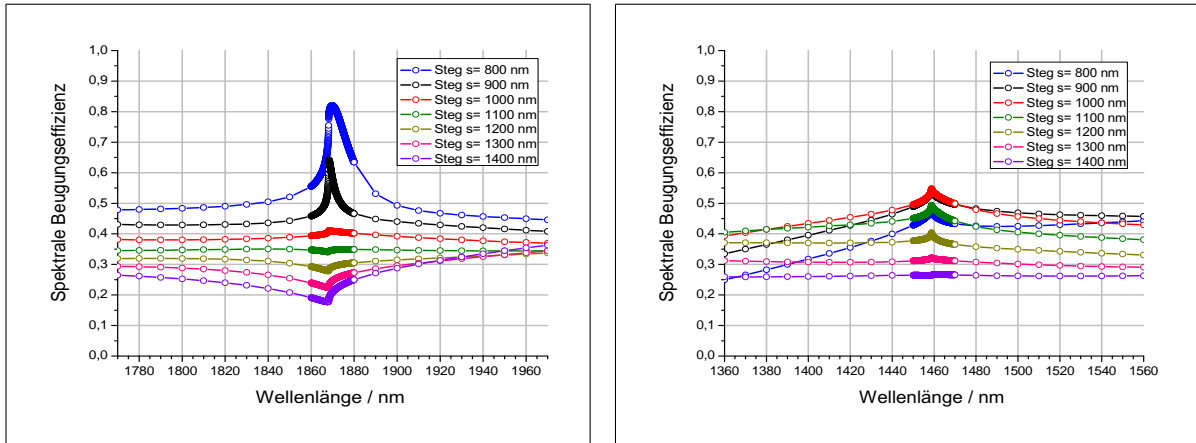


Abbildung 5.7: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; Einfluss auf die +1. Beugungsordnung bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (links) und bei Verschwinden der +2. Beugungsordnung (rechts)

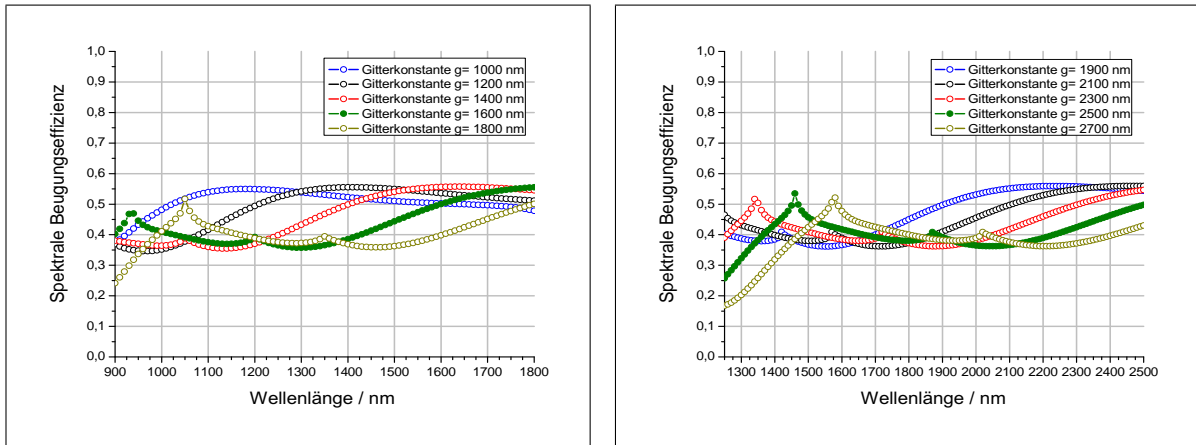


Abbildung 5.8: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von trapezförmigen Gitterstrukturen für ein festes Verhältnis von Stegbreite zu Gitterkonstante s/g in Abhängigkeit der Gitterkonstante g ; links: $s/g = 0,41$, Wellenlängenbereich 900 nm - 1800 nm; rechts: $s/g = 0,4$, Wellenlängenbereich 1250 nm - 2500 nm

über den gesamten Spektralbereich lässt sich ebenfalls bei der geringsten Stegbreite s von 800 nm mit Werten von 13,5% bis 82,0% und einem Mittelwert von 41,0% erreichen. Die geringste ergibt sich gleichzeitig bei der größten gewählten Stegbreite von 1400 nm mit Werten von 17,7% bis 53,4% und einem Mittelwert von 36,2%.

Die Werte liegen hier deutlich näher zusammen, das Optimum ergibt sich also primär aus der Minimierung der Effizienzsprünge (s. Abb. 5.7). Auch hier müssen zwei verschwindende Ordnungen betrachtet werden, die +2. Beugungsordnung bei 1459 nm und die -1. Beugungsordnung bei 1868 nm. Ein Optimum ergibt sich bei einer Stegbreite s von 1000 nm. In diesem Fall wird eine hohe mittlere Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung erreicht und gleichzeitig die Effizienzsprünge auf ein Minimum reduziert. Die Effizienzwerte liegen in einem Bereich von 25,7%

bis 53,5% und einem Mittelwert von 40,5%.

Auch hier würde sich eine Reduktion der Gitterkonstante g positiv auf die Beugungseffizienz auswirken (s. Abb. 5.8), unter Berücksichtigung der bereits zuvor erwähnten Wechselwirkungen. Bei einer Gitterkonstante von beispielsweise 1900 nm und bei Beibehaltung des Verhältnisses von Stegbreite zu Gitterkonstante von 1000 nm zu 2500 nm erhöht sich die erreichbare spektrale Effizienz der +1. Beugungsordnung auf Werte von 36,1% bis 55,9% und einem Mittelwert von 47,1%. Gleichzeitig propagiert die +2. Beugungsordnung im gesamten spektralen Bereich nicht mehr, ihr Effizienzsprung verschwindet dadurch vollständig aus dem gemessenen Spektrum.

5.2.2 Effizienzsimulation sinusförmiger Gitterstrukturen

Basierend auf den bereits beschriebenen trapezförmigen Gitterstrukturen ist es möglich sinusförmige Gitterstrukturen durch Verwendung von Halbleiter- bzw. MEMS-kompatiblen Prozessen herzustellen. Typischerweise werden sinusförmige Gitterstrukturen durch Holografie generiert (vgl. Kap. 5.1). Gitter dieser Art sind bereits bekannt für eine hohe erreichbare Effizienz. Die Herstellung sinusförmiger Gitterstrukturen erfolgt in dieser Arbeit jedoch durch eine speziell für die Prozessintegration entwickelte Herstellungsvariante. Dabei wird eine Bor- und Phosphordotierte Siliziumoxidschicht auf die bereits bestehende trapezförmige Gitterstruktur abgeschieden, die durch den eingesetzten Chemical Vapour Deposition Prozess (CVD) konform bedeckt wird. Durch eine nachfolgende Temperung verfließt das dotierte Siliziumoxid [79] und bildet dadurch eine sinusförmige Abbildung der trapezförmigen Grundstruktur. Abschließend wird die erzeugte Sinusstruktur flächig mit einer Aluminiumschicht überzogen, um eine hohe Reflektivität des hergestellten Gitters zu sichern.

Die Form der sich ausbildenden sinusförmigen Oberfläche ist von mehreren Parametern abhängig: der zugrunde liegenden Trapezstruktur, der Fließeigenschaft des Siliziumoxids und den Einstel-

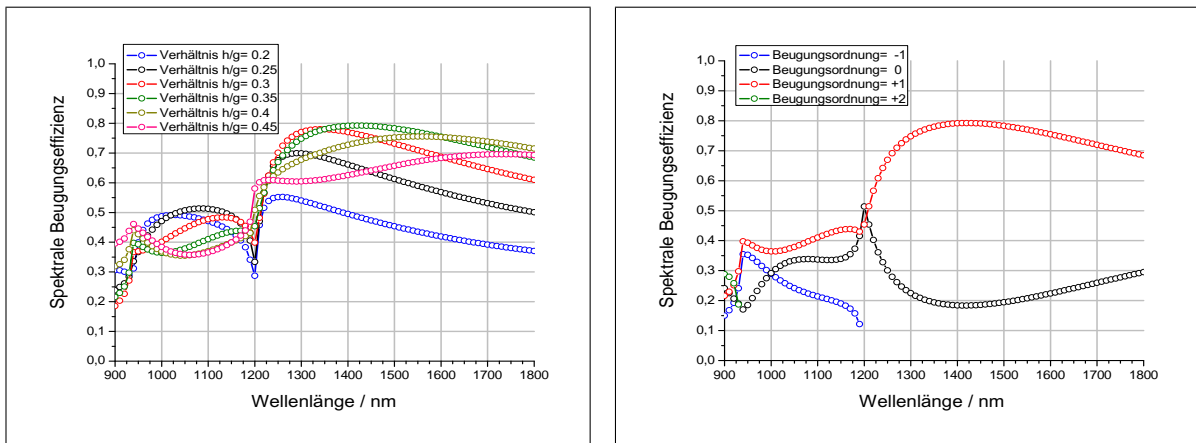


Abbildung 5.9: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm; links: +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g ; rechts: Alle propagierenden Beugungsordnungen bei einem optimierten Verhältnis h/g von 0,35

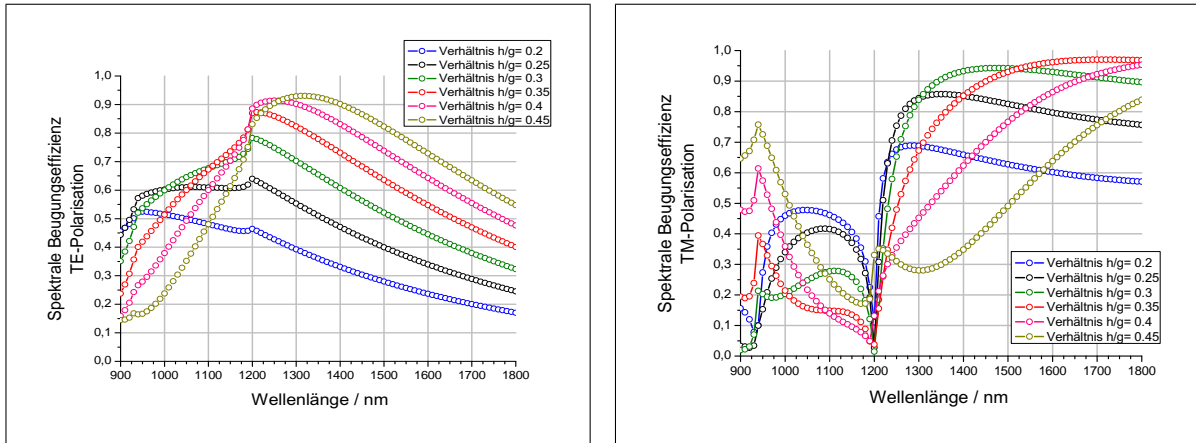


Abbildung 5.10: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g ; links: +1. Beugungsordnung, TE-Polarisation; rechts: +1. Beugungsordnung, TM-Polarisation

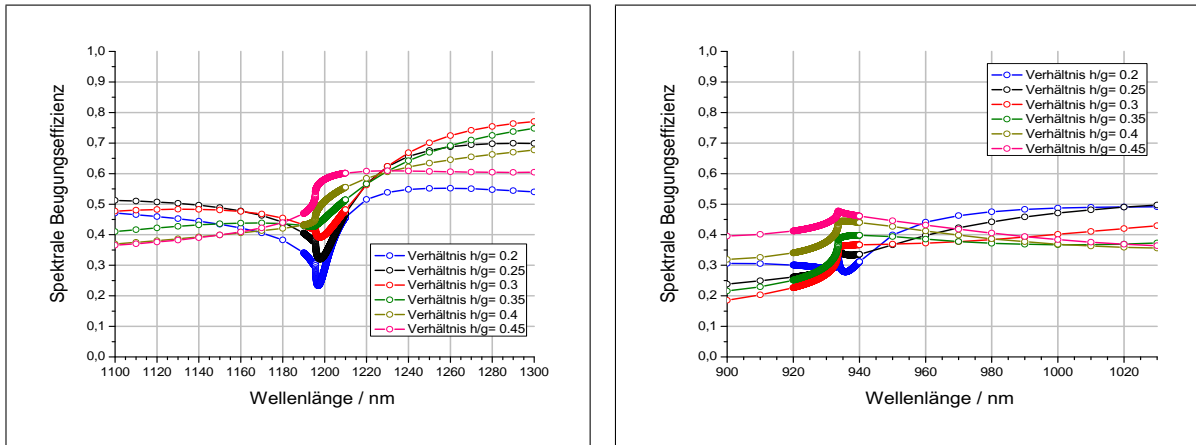


Abbildung 5.11: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g ; Einfluss auf die +1. Beugungsordnung bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (links) und bei Verschwinden der +2. Beugungsordnung (rechts)

lungen der Temperung. Grundlage für die Effizienzsimulationen bildet das Ziel, möglichst hohe Effizienzwerte der +1. Beugungsordnung zu erreichen und Effizienzsprünge im Spektrum, hervorgerufen durch verschwindende Effizienzordnungen, soweit wie möglich zu minimieren.

Für eine Gitterkonstante von 1600 nm, eingesetzt für den Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm, wurden zunächst ideal geformte Sinusstrukturen simuliert. Die Periode der Sinusstruktur ist dabei bereits durch die Gitterkonstante vorgegeben, das Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g wurde in einem Bereich von 0,2 bis 0,45 mit einer Schrittweite von 0,05 variiert (s. Abb. 5.9). Die maximale Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung über den gesamten Spektralbereich ergibt sich bei einem Verhältnis von 0,35. Sie ist wie bereits beschrieben aus dem arithmetischen Mittel der beiden Transversalwellen (TE, TM) berechnet worden (s.

Abb. 5.10). Die Effizienzwerte liegen zwischen 21,6% und 79,2% bei einem Mittelwert von 61,7%. Die geringste Effizienz ergibt sich bei einem Verhältnis von 0,2, die Werte liegen hier zwischen 29,8% und 55,2% bei einem Mittelwert von 44,6%.

Wie bereits bei den trapezförmigen Gitterstrukturen zu erkennen, erfolgen Effizienzsprünge im Spektrum ebenfalls bei einer Wellenlänge von 933 nm und 1196 nm, bei der die +2. Beugungsordnung und -1. Beugungsordnung aufgrund der Beugungsbedingung nicht weiter propagieren (s. Abb. 5.11). Der geringste Einfluss der Sprünge ergibt sich ebenfalls bei einem Verhältnis h/g von 0,35. Somit ist dieses Verhältnis sowohl aus Effizienzbetrachtung heraus, wie auch im Hinblick auf den Einfluss durch den Effizienzsprung die Variante mit den besten Werten. Im Vergleich zu trapezförmigen Gittern sind die Sprünge jedoch stärker ausgeprägt und können nicht genauso stark unterdrückt werden. Für den optimierten Fall des Sinusgitters ist in Abb. 5.9 die Beugungseffizienz aller propagierender Beugungsordnungen dargestellt. Es wird deutlich, dass die Effizienz der +1. Beugungsordnung zunimmt, je weniger Beugungsordnungen propagieren.

Auch hier würde sich folglich eine Reduktion der Gitterkonstante g positiv auf die erreichbare Effizienz der +1. Beugungsordnung auswirken. Zu berücksichtigen ist jedoch auch in diesem Fall die Wechselwirkung mit den übrigen Spektrometereigenschaften, wie bereits zuvor erwähnt. Effizienzsimulationen für variierte Gitterkonstanten g sind in Abb. 5.15 dargestellt. Es ist erkennbar, dass bereits eine Reduktion auf 1500 nm dazu führt, dass die +2. Beugungsordnung im zur Messung bestimmten Wellenlängenbereich nicht mehr propagiert. Allein hierdurch ist bereits eine Effizienzsteigerung auf Werte von 36,8% bis 79,0% und einem Mittelwert von 64,0% möglich. Reduziert man die Gitterkonstante weiter zu Werten unterhalb 1200 nm so verschwindet auch die -1. Beugungsordnung aus dem Spektrum. In diesem Fall sind keine Effizienzsprünge mehr vorhanden und es werden gleichzeitig die höchsten Effizienzwerte erzielt. Sie ergeben sich bei einer Gitterkonstante g von 1100 nm zu Werten von 52,8% bis 76,4% bei einem Mittelwert von 64,0%.

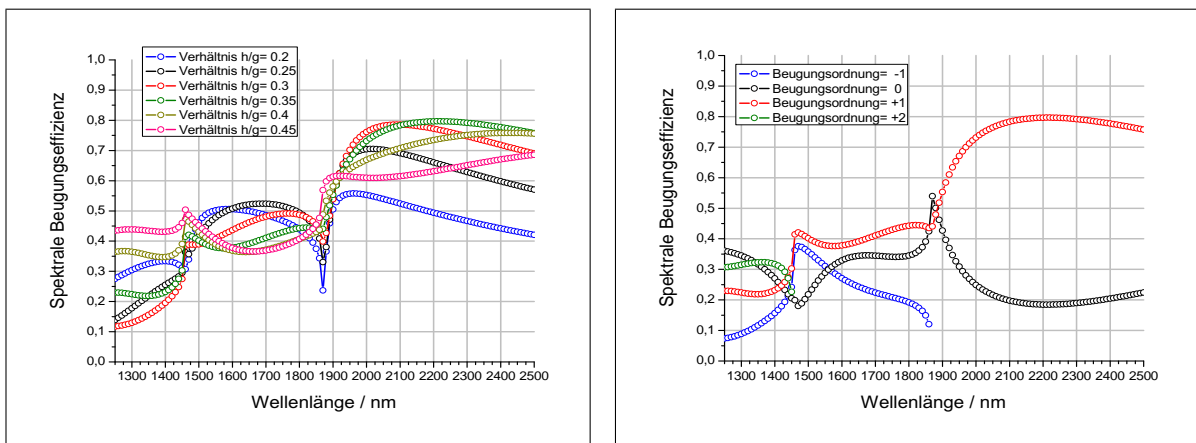


Abbildung 5.12: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm; links: +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g ; rechts: Alle propagierenden Beugungsordnungen bei einem optimierten Verhältnis h/g von 0,35

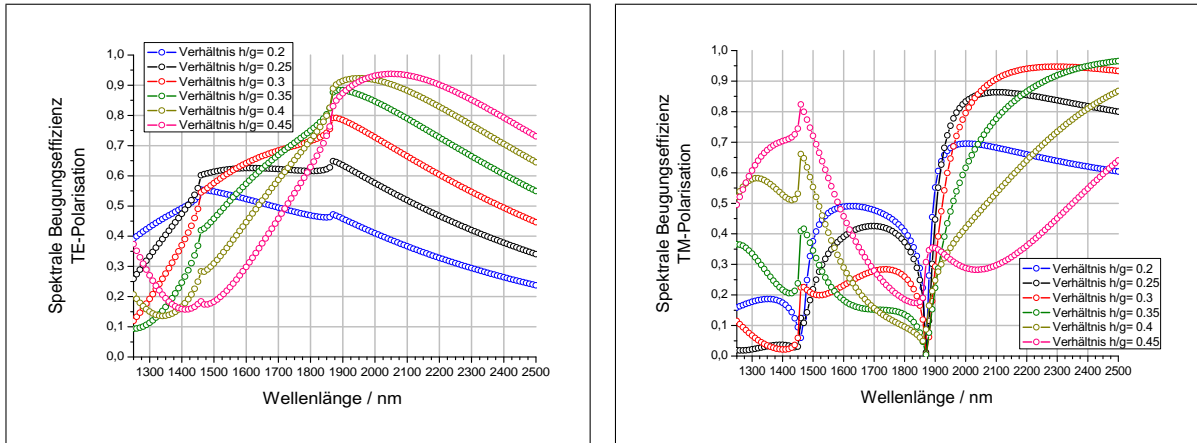


Abbildung 5.13: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g ; links: +1. Beugungsordnung, TE-Polarisation; rechts: +1. Beugungsordnung, TM-Polarisation

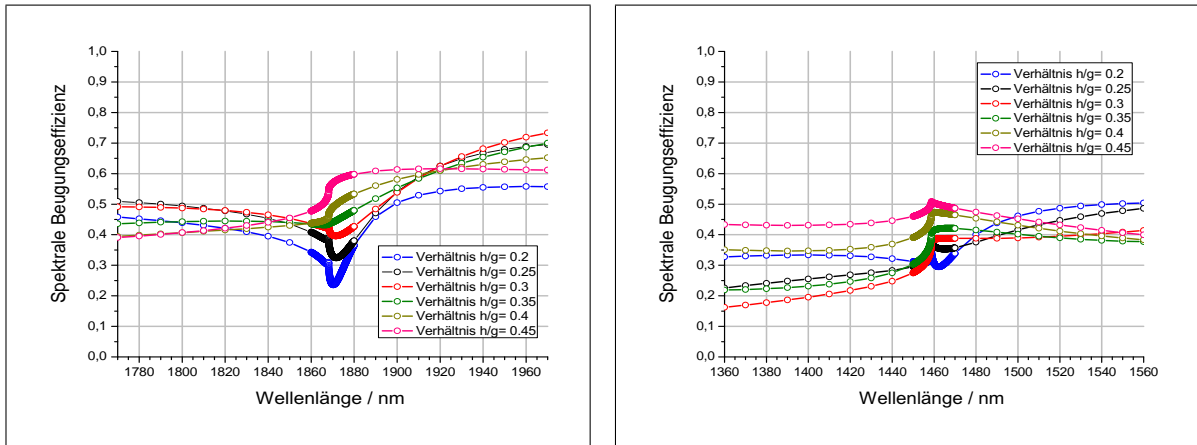


Abbildung 5.14: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm in Abhängigkeit des Verhältnisses Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g ; Einfluss auf die +1. Beugungsordnung bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (links) und Verschwinden der +2. Beugungsordnung (rechts)

Aufgrund des hier verwendeten Herstellungsverfahrens der sinusförmigen Gitter wird ihre Form maßgeblich durch die zugrunde liegende trapezförmige Struktur bestimmt. Daher ist es durchaus möglich, dass sich sinusförmige Strukturen ausbilden, die sich leicht von einer idealen Sinusform unterscheiden. In der Simulation wurde dieser Effekt abgebildet, indem die Breite der unteren Halbwelle der Sinusform c_u im Verhältnis zur oberen Halbwelle c_o variiert wurde. Die summierte Breite, die gleichbedeutend der Periode der Sinusform bzw. der Gitterkonstante ist, blieb dabei unverändert.

In Abb. 5.16 sind Simulationsergebnisse der Effizienz der +1. Beugungsordnung für unterschiedliche Verhältnisse von c_o und c_u bei einem idealen Strukturverhältnis h/g von 0,35 aufgezeigt. Es zeigt sich, dass eine Minimierung der Breite der unteren Halbwelle c_u vom Idealwert mit 0,5 auf

einen Wert bis 0,3 vor allem eine Reduktion der Beugungseffizienz im oberen Wellenlängenbereich hervorruft. Die maximal erreichbare Effizienz sinkt dadurch auf bis zu 64,5%, der Mittelwert reduziert sich auf bis zu 49,1%. Eine Verringerung der Breite der oberen Halbwelle c_o auf Werte bis 0,3 führt dagegen zu einer Reduktion der Effizienz im niedrigen Wellenlängenbereich. Die minimale Beugungseffizienz sinkt dadurch auf bis zu 10,5%, der Mittelwert verringert sich verhältnismäßig gering auf bis zu 58,7%. Eine Abweichung von der idealen Sinusform führt folglich immer zu einer Reduktion der erreichbaren Beugungseffizienz.

Äquivalent zu den bereits aufgeführten Effizienzuntersuchungen wurden ebenfalls Gitter mit einer Gitterkonstante von 2500 nm für den zu messenden Wellenlängenbereich von 1250 nm - 2500 nm simuliert. Das Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g für eine ideale Sinusstruktur wurde hier ebenfalls in einem Bereich von 0,2 bis 0,45 mit einer Schrittweite von 0,05 variiert (s. Abb. 5.12). Das Maximum der Effizienz der +1. Beugungsordnung wird bei einem Verhältnis von 0,35 erreicht, mit Werten von 21,9% bis 79,7% und einem Mittelwert von 55,1%. Das Minimum liegt bei einem Verhältnis von 0,2, mit Werten von 23,6% bis 55,8% und einem Mittelwert von 45,0%. Auch für diesen Fall wurden die Effizienzwerte aus den simulierten Transversalwellen (TE, TM) berechnet (s. Abb. 5.13).

Die im Spektrum enthaltenen Effizienzsprünge (s. Abb. 5.14), hervorgerufen durch das Verschwinden der +2. und -1. Beugungsordnung, sind für Strukturverhältnisse h/g von 0,35 bis 0,45 vergleichbar. Für die weiteren Verhältnisse verschlechtern sie sich. Aus diesem Grund liegt das Optimum ebenfalls bei einem Verhältnis von 0,35, da hier parallel die höchste Effizienz erreicht werden kann. Eine weitere Erhöhung der Effizienz ist ebenfalls durch eine Verringerung der Gitterkonstante g möglich (s. Abb. 5.15). Bei Werten unterhalb von 2100 nm propagiert nur noch die -1. Beugungsordnung, bei einer Gitterkonstante von 1700 nm können beispielsweise Effizienzwerte zwischen 20,2% bis 79,4% bei einem Mittelwert von 67,1% erreicht werden.

Abweichungen von der idealen Sinusstruktur wurden ebenfalls simuliert (s. Abb. 5.16). Varia-

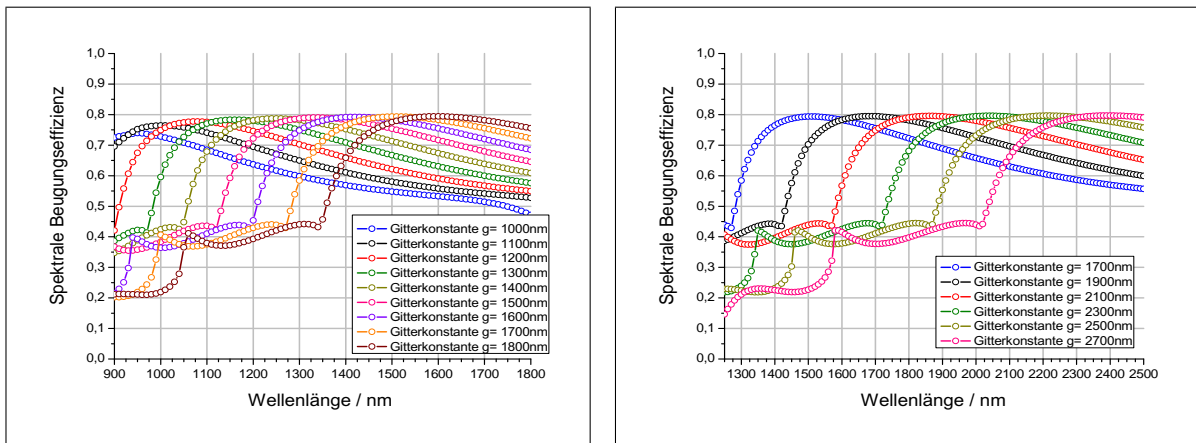


Abbildung 5.15: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen für ein festes Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g in Abhängigkeit der Gitterkonstante g ; links: $h/g = 0,35$, Wellenlängenbereich 900 nm - 1800 nm; rechts: $h/g = 0,35$, Wellenlängenbereich 1250 nm - 2500 nm

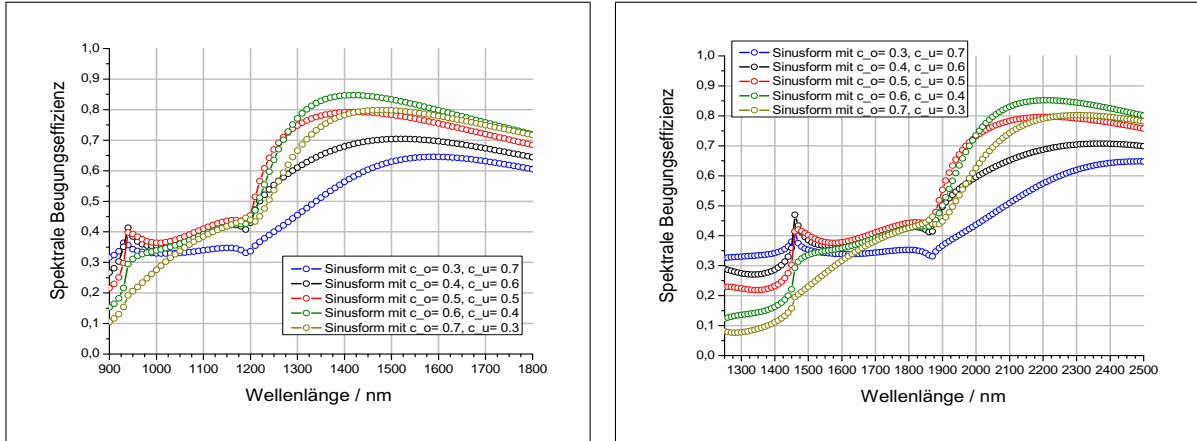


Abbildung 5.16: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von sinusförmigen Gitterstrukturen für ein festes Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g in Abhängigkeit des Verhältnisses der Breite der oberen zur unteren Sinushalbwelle c_o, c_u (in Summe normiert auf 1); links: $h/g = 0,35$, Gitterkonstante 1600 nm; rechts: $h/g = 0,35$, Gitterkonstante 2500 nm

tionen der Breite der oberen c_o und der unteren Halbwelle c_u der Sinusstruktur wurden im Verhältnis von 0,3 bis 0,7 für das bevorzugte Strukturverhältnis h/g von 0,35 berücksichtigt. Auch in diesem Fall zeigt sich, dass eine Abweichung von der idealen Sinusstruktur grundsätzlich zu geringeren Effizienzwerten über den gesamten Wellenlängenbereich führt. Verringerungen der Breite der unteren Halbwelle c_u führen zu einer Reduzierung der Effizienz im oberen Wellenlängenbereich, im unteren Bereich erhöht sie sich allerdings geringfügig. Umgekehrt verhält es sich bei Reduzierung der Breite der oberen Halbwelle c_o . In diesem Fall verringert sich die Effizienz im unteren Wellenlängenbereich.

5.2.3 Effizienzsimulation geblazter Gitterstrukturen

Geblazte Gitterstrukturen sind in der Optik als Strukturen mit der höchsten zu erreichenden Beugungseffizienz bekannt [24]. Sie bestehen im Idealfall aus rechtwinkligen Dreiecksstrukturen, deren Steigungswinkel α_b , im weiteren Blazewinkel genannt, gemessen zur Oberfläche speziell auf eine Wellenlänge angepasst ist (s. Abb. 5.17). Die höchste Beugungseffizienz des Gitters ist unter senkrechtem Einfall auf die Schräge des geblazten Gitters zu erreichen (Littrow-Konfiguration). In diesem Fall sind Einfalls- und Ausfallswinkel identisch und theoretische Effizienzen von 100% möglich. Der ideale Blazewinkel α_b lässt sich aus der allgemeinen Beugungsbedingung (Gl. 3.1) herleiten. Es gilt

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot g \cdot \sin(\alpha_b) \quad \text{bzw.} \quad \alpha_b = \sin^{-1} \left(\frac{n \cdot \lambda}{2 \cdot g} \right) \quad (5.12)$$

Für Wellenlängen, die von dem für eine spezielle Wellenlänge berechneten Blazewinkel abweichen, ergibt sich automatisch eine Reduzierung der Effizienz. Aus diesem Grund ist es zweckmäßig, die mittlere Wellenlänge für einen zu messenden Spektralbereich als Referenz für die Berechnung des Blazewinkels zu verwenden. Damit ist gewährleistet, dass die Effizienzminimierung der anderen Wellenlängen so gering wie möglich gehalten wird.

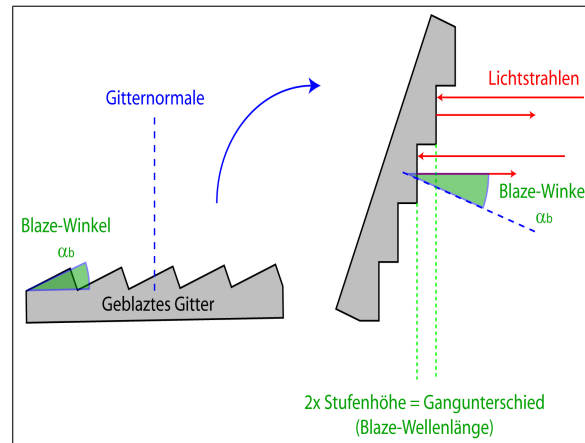


Abbildung 5.17: Prinzipskizze eines geblazten Beugungsgitters in Littrow-Konfiguration

Die Herstellung von geblazten Gitterstrukturen kann äquivalent zu den zuvor beschriebenen trapezförmigen Gittern erfolgen. Hierfür sind allerdings spezielle Siliziumsubstrate erforderlich, um die hohe Ätzselektivität von $\{100\}$ - zu $\{111\}$ -Siliziumebenen in der TMAH-Ätzlösung weiterhin auszunutzen. Die Oberfläche des Wafers muss eine um genau den Blazewinkel α_b verkippte $\{111\}$ -Ebene aufweisen, da diese Ebene die Oberfläche des herzustellenden Blazegitters definiert. Änderungen des Blazewinkels zur Wellenlängenanpassung erfordern daher immer speziell angepasstes Substratmaterial.

Die Strukturierung der Blazegitter erfolgt ebenfalls über eine Hartmaske aus Siliziumoxid, die die Grenzen der einzelnen Gruben im Gitter definiert (s. Abb. 5.1). So entstehen Stege s zwischen den dreiecksförmigen Gruben, wie schon bei trapezförmigen Gitterstrukturen bekannt. Da der Blazewinkel durch das Substrat festgelegt ist, sind diese Stege der einzige zu optimierende Parameter zur Realisierung einer größtmöglichen Beugungseffizienz der geblazten Gitter.

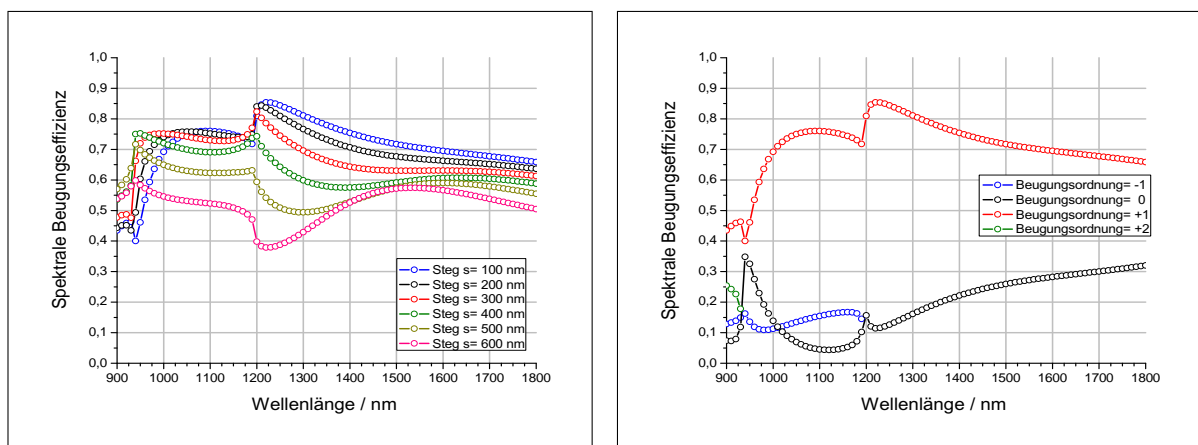


Abbildung 5.18: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von geblazten Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm; links: +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s ; rechts: Alle propagierenden Beugungsordnungen bei einer optimierten Stegbreite s von 100 nm

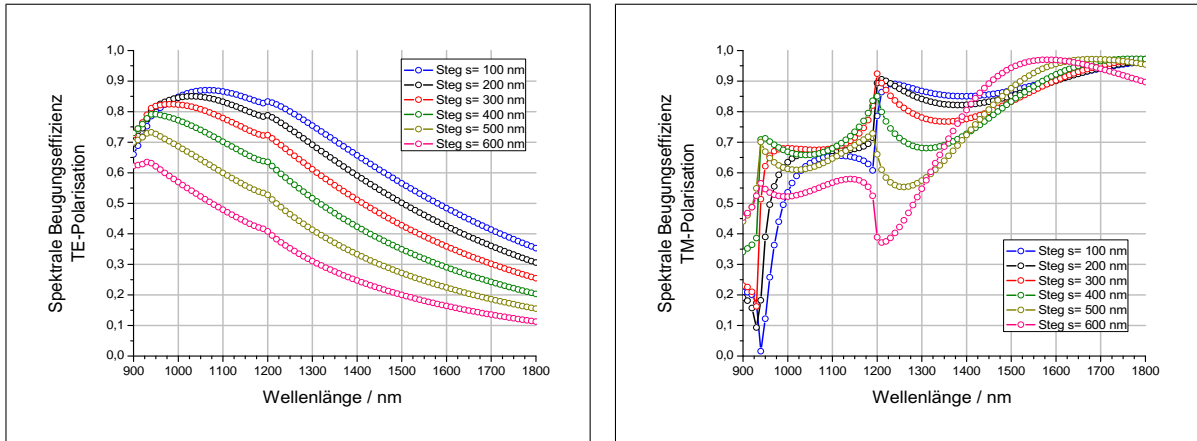


Abbildung 5.19: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von geblazten Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; links: +1. Beugungsordnung, TE-Polarisation; rechts: +1. Beugungsordnung, TM-Polarisation

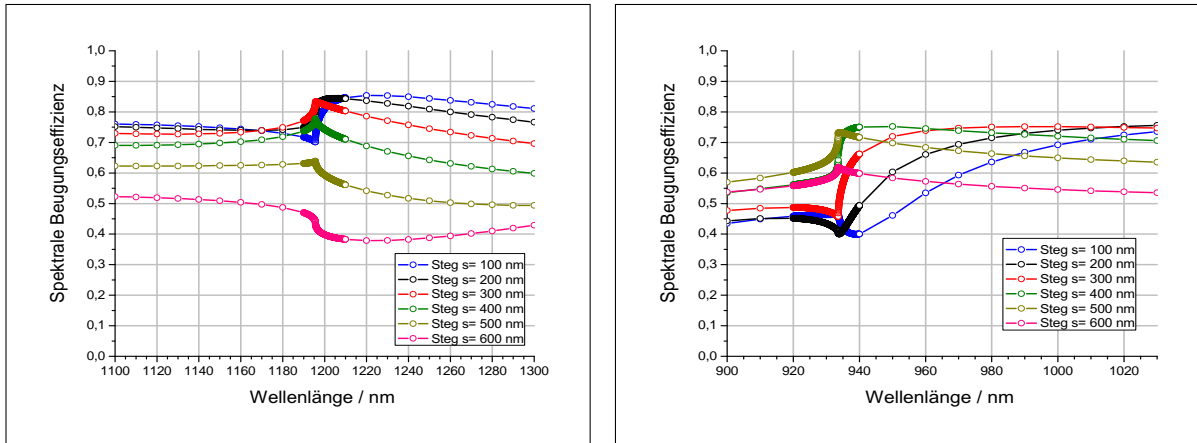


Abbildung 5.20: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von geblazten Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; Einfluss auf die +1. Beugungsordnung bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (links) und Verschwinden der +2. Beugungsordnung (rechts)

Für eine Gitterkonstante von 1600 nm wurden geblazte Gitterstrukturen der oben beschriebenen Form mit Stegbreiten von 100 nm bis 600 nm bei einer Schrittweite von 100 nm und einem optimierten Blazewinkel α_b von 25° simuliert (s. Abb. 5.18/5.19). Die höchste Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung lässt sich demnach bei der geringsten Stegbreite von 100 nm erzielen. Die Werte liegen zwischen 39,9% und 85,4% bei einem Mittelwert von 71,2% über den gesamten Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm. Die geringsten Werte sind bei einer Stegbreite von 600 nm gegeben, mit Werten von 37,9% bis 61,9% bei einem Mittelwert von 51,9%.

Die Effizienzpeaks, erzeugt durch das Verschwinden der +2. bzw. -1. Beugungsordnung bei den bereits bekannten Wellenlängen von 933 nm bzw. 1196 nm, zeigen sich deutlich im simulierten Spektrum (s. Abb. 5.20). Sie verändern sich zwar mit unterschiedlicher Stegbreite, ein Optimum

ist zwischen den hier simulierten Varianten jedoch nicht eindeutig zu finden. Aufgrund der höchsten Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung bei der geringsten Stegbreite von 100 nm ist dies folglich die zu bevorzugende Variante. Die Beugungseffizienz aller propagierenden Beugungsordnungen ist für diesen Fall in Abb. 5.18 dargestellt. Es ist offensichtlich, dass die Effizienz mit jeder Verringerung der propagierenden Ordnungen deutlich zunimmt. Auch in diesem Fall könnte die Effizienz somit deutlich gesteigert werden, indem die Gitterkonstante auf unter 1204 nm gesenkt würde. Ab dieser Grenze propagiert nur noch die +1. und die 0. Beugungsordnung, Effizienzsprünge im Spektralbereich würden verhindert.

Für eine Gitterkonstante von 2500 nm wurden ebenfalls Effizienzsimulationen durchgeführt, mit Stegbreiten von 100 nm bis 600 nm bei einer Schrittweite von 100 nm und einem optimierten Blazewinkel α_b von 22° (s. Abb. 5.21/5.22). Maximale Effizienzwerte der +1. Beugungsordnung

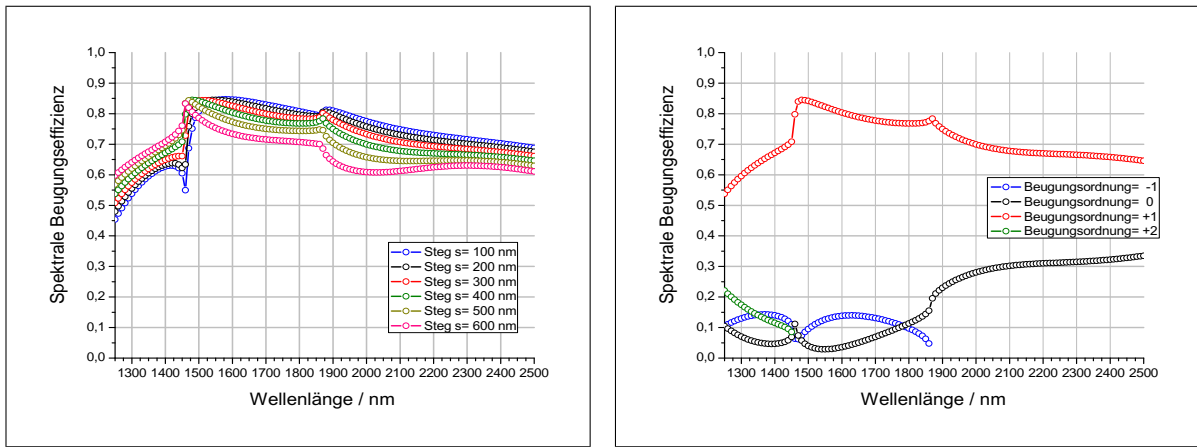


Abbildung 5.21: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von geblazten Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm; links: +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Stegbreite s ; rechts: Alle propagierenden Beugungsordnungen bei einer optimierten Stegbreite s von 400 nm

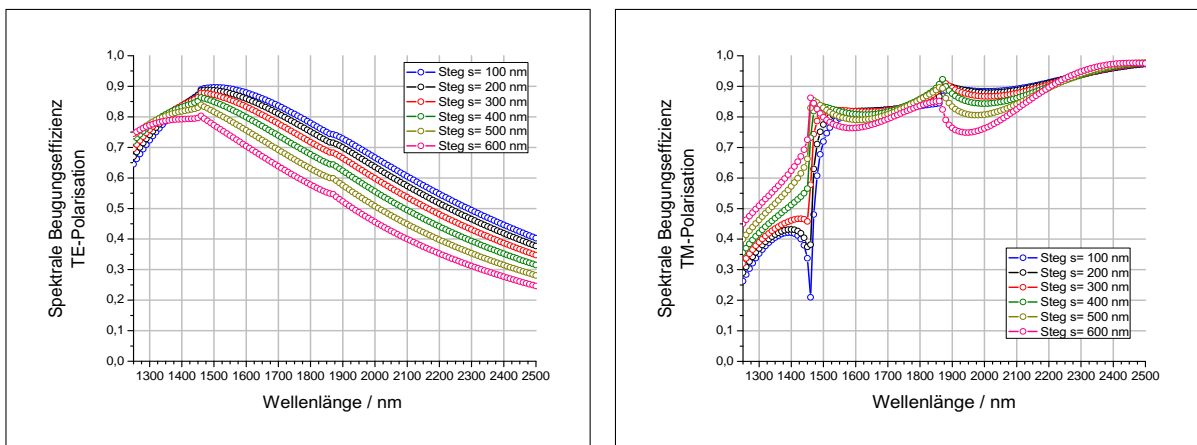


Abbildung 5.22: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von geblazten Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; links: +1. Beugungsordnung, TE-Polarisation; rechts: +1. Beugungsordnung, TM-Polarisation

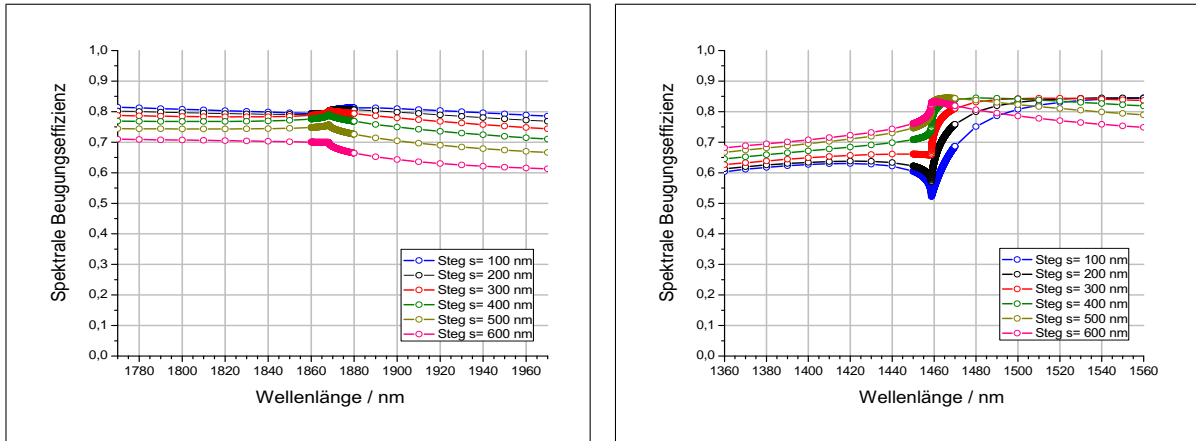


Abbildung 5.23: Simulation der spektralen Beugungseffizienz von geblazten Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm in Abhängigkeit der Stegbreite s ; Einfluss auf die +1. Beugungsordnung bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (links) und bei Verschwinden der +2. Beugungsordnung (rechts)

ergeben sich wiederum bei der geringsten Stegbreite von 100 nm. Dort liegen die Werte zwischen 52,2% und 84,7% bei einem Mittelwert von 73,6%. Die geringsten Effizienzen resultieren gleichzeitig bei der höchsten Stegbreite von 600 nm mit Werten von 59,7% bis 83,3% und einem Mittelwert von 66,8%. Die Effizienzkurven liegen demgegenüber jedoch deutlich enger zusammen, wodurch höhere Toleranzen im Herstellungsprozess akzeptiert werden können.

Durch das Verschwinden der +2. und -1. Beugungsordnung zeigen sich auch hier Effizienzsprünge im simulierten Spektrum (s. Abb. 5.23). Während die Sprünge bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung (1868 nm) für alle Stegbreiten gering ausfallen, sind sie beim Verschwinden der +2. Beugungsordnung (1459 nm) signifikant. Dabei zeigt eine Stegbreite von 400 nm das beste Verhalten. Wie bereits erwähnt, unterscheiden sich die Effizienzen der unterschiedlichen Stegbreiten nicht maßgeblich voneinander. Aus diesem Grund kann das Optimum bei einer Stegbreite von 400 nm festgelegt werden. Bei Betrachtung aller propagierenden Beugungsordnungen bei der als Optimum definierten Stegbreite von 400 nm (s. Abb. 5.21) wird deutlich, dass die Effizienz durch das Verschwinden der unerwünschten Beugungsordnungen erheblich zunimmt. Auch in diesem Fall wäre eine Verringerung der Gitterkonstante g aus Effizienzbetrachtungen vorteilhaft, ebenfalls im Hinblick der doch erheblichen Effizienzsprünge bei Verschwinden der -1. Beugungsordnung.

5.2.4 Zusammenfassung der Simulationsergebnisse

Betrachtet man die in dieser Arbeit beschriebenen Gitterstrukturen aus rein effizienzrelevanten Gesichtspunkten (s. Tab 5.2) wird deutlich, dass sich die höchste Effizienz der zur Messung verwendeten +1. Beugungsordnung mit geblazten Gittern bei 73,6% erreichen lässt, gefolgt von sinusförmigen bei 61,7% und abschließend trapezförmigen Gittern bei 48,7%. Berücksichtigt man aber zusätzlich die Effizienzsprünge im simulierten Spektrum, die aufgrund der vorgegebenen Gitterkonstanten von 1600 nm bzw. 2500 nm auftreten, so ergibt sich, dass eine Minimierung dieser unerwünschten Sprünge am besten mit trapezförmigen Gittern erreicht werden kann. Sinusförmige

ge bzw. geblazte Gitterstrukturen sind somit nur dann durch ihre Eigenschaften überlegen, wenn die Gitterkonstante so gering gewählt werden kann, dass ausschließlich die +1. und 0. Beugungsordnung propagieren. Da die Gitterkonstante ein signifikanter Parameter für viele Eigenschaften des Spektrometers, wie auch des mikromechanischen Beugungsgitters darstellt (vgl. Kap. 4), sind zahlreiche weitere Anforderungen zu berücksichtigen. Aus diesem Grund ist eine reine Bewertung durch Effizienzbetrachtungen nicht ausreichend.

Ebenfalls zu beachten sind die veränderbaren Strukturparameter der einzelnen Gittervarianten. Während trapezförmige und geblazte Gitter allein durch die Kristallorientierung des Substrats und der Stegbreite definiert werden, sind sinusförmige Gitterstrukturen überdies von den Materialeigenschaften des fließenden Siliziumoxids abhängig und auch deutlich empfindlicher gegenüber Variationen der trapezförmigen Grundstruktur, um eine möglichst ideale Sinusform zu erreichen. Jeder dieser Parameter unterliegt gewissen Fertigungstoleranzen, je höher deshalb die Anzahl, desto anspruchsvoller die Kontrolle des Prozesses. Zur Herstellung von geblazten Gitterstrukturen werden Substrate mit spezieller Kristallorientierung benötigt, die sich von herkömmlichen Wafern unterscheiden und nur durch Sonderanfertigungen erhältlich sind. Änderungen der Gitterkonstante bzw. des Wellenlängenbereichs erfordern somit immer angepasste Substrate.

Fasst man diese Überlegungen zusammen, so bieten trapezförmige Gitterstrukturen zwar die geringste Beugungseffizienz, sie sind allerdings hinsichtlich der Fertigungstoleranzen und der Anforderungen an das Substratmaterial den anderen Varianten überlegen. Aus diesem Grund werden sie als Gittervariante zur Herstellung der mikromechanischen Beugungsgitter bevorzugt.

Tabelle 5.2: *Simulierte mittlere Beugungseffizienz der optimierten Gitterstrukturen*

Gitterform		Gitterkonstante 1600 nm	Gitterkonstante 2500 nm
Trapezförmig			
Beugungseffizienz (Steg s= 650 nm)*	%	47,7	-
Beugungseffizienz (Steg s= 1000 nm)*	%	-	40,5
Sinusförmig			
Beugungseffizienz ($h/g = 0,35$)*	%	61,7	-
Beugungseffizienz ($h/g = 0,35$)*	%	-	55,1
Blaze			
Beugungseffizienz (Steg s= 100 nm)*	%	71,2	-
Beugungseffizienz (Steg s= 400 nm)*	%	-	73,6

* Zur Messung verwendete +1. Beugungsordnung

5.3 Analyse des Herstellungsverfahrens für mikromechanische Beugungsgitter

In diesem Kapitel werden alle für die Entwicklung der mikromechanischen Beugungsgitter relevanten Aspekte der Herstellung diskutiert. Die hierfür verwendete anisotrope Siliziumätzung zur Fabrikation der unterschiedlichen Gitterstrukturen weist dabei gegenüber den anderen bereits vorgestellten Herstellungsvarianten (vgl. Kap. 5.1) einen signifikanten Vorteil auf. Die Gitterkonstante g ist in der hier vorgestellten Technologie allein von der Qualität der Lithografie abhängig, die wegen der Affinität zur reinen Mikroelektronik inzwischen eine sehr hohe Genauigkeit aufweist. Die Gitterkonstante wird nicht durch weiterführende Prozessschwankungen in der Herstellung beeinflusst. Diese Schwankungen können zwar die Breite der Gitterstege verändern, beeinflussen jedoch ausschließlich die erreichbare Effizienz der Gitterstrukturen. Dadurch ist es erst möglich, Gitterstrukturen mit einer minimalen Abweichung der Gitterkonstante herzustellen, wie sie aus Kap. 4.2 mit einer maximalen Abweichung von $\pm 5 \text{ nm}$ gefordert wird, um Ghosts im gemessenen Spektrum zu unterdrücken.

5.3.1 Herstellung trapezförmiger Gitterstrukturen

Die Herstellung von trapezförmigen Gitterstrukturen startet wie bereits zuvor erwähnt mit der Abscheidung einer Oxid-Hartmaske. Diese ist notwendig, da eine Lackmaske in der zur anisotropen Siliziumätzung verwendeten TMAH-Lösung angegriffen wird und ihr somit nicht widerstehen kann. Die Abscheidung des Oxids erfolgt thermisch bei einer Ofentemperatur von 900°C unter O_2 und H_2 Atmosphäre. Die Schichtdicke kann durch diesen Prozess sehr genau eingestellt werden und beträgt 28 nm . Sie über ein Schichtdickenmessgerät, das auf Reflektometrie basiert, überwacht und zeigt eine Streuung von 1 nm .

Die Strukturierung der Hartmaske erfolgt durch eine $1,2 \text{ }\mu\text{m}$ dicke Lackmaske. Die Strukturübertragung von der Chrommaske in die Lackschicht ist maßgeblich durch die Qualität der Belichtungsanlage (Lithografie) vorgegeben. Werte hierzu sind bereits in Kap. 5.1 beschrieben worden. Weitere Abweichungen, hervorgerufen durch das Auflösungsvermögen des Lackes, können vernachlässigt werden. Die Strukturierung der Hartmaske erfolgt über eine nasschemische Ätzung in einer gepufferten HF-Lösung. Durch die geringe Dicke der Oxidschicht kann die Ätzzeit auf einen Wert von 40 s reduziert werden, wobei eine sichere Überätzung zur Prozessstabilität bereits berücksichtigt ist. Die Ätzrate beträgt 1 nm/s . Dadurch ergibt sich eine laterale Unterätzung der Lackmaske von ca. 40 nm pro Kante, die Grubenöffnung b der Gitterstruktur erhöht sich damit abweichend zum Design um ca. 80 nm .

Alternativ zu diesem Verfahren ist ebenfalls eine trockenchemische Ätzung der Oxidmaske mittels reaktivem Ionenätzen (RIE) möglich. Die Abweichung der Grubenöffnung wird dadurch auf ein zu vernachlässigendes Niveau begrenzt. Allerdings ist die Selektivität zum unterliegenden Silizium wesentlich geringer und beträgt nur ca. 10:1 (ca. 200:1 bei gepufferter HF-Lösung). Die Ätzrate ist mit ca. 80 nm/s deutlich höher, Prozesszeiten für die Ätzung einer 28 nm dicken Oxidschicht sind deshalb sehr kurz. Die Oxiddicke wurde aus diesem Grund auf mindestens 90 nm erweitert. Durch die geringere Selektivität und den zusätzlichen physikalischen Einfluss der Ätzung kann eine lokale Schädigung der Siliziumoberfläche beobachtet werden, die allerdings

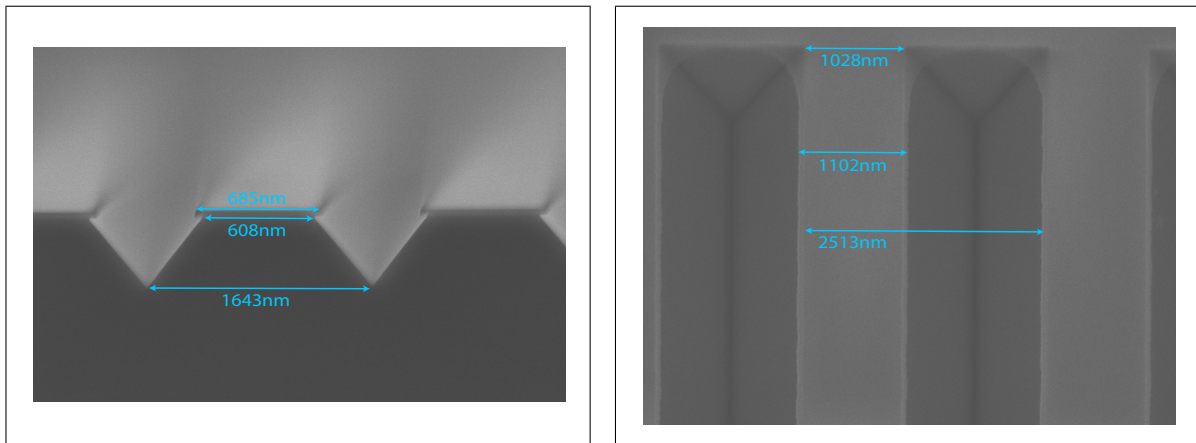


Abbildung 5.24: REM-Aufnahme von trapezförmigen Beugungsgittern vor der Entfernung der Oxid-Hartmaske; links: Strukturform im Bruch bei einer Gitterkonstante von 1600 nm; rechts: Aufsicht auf die Oberfläche der Gitterstruktur bei einer Gitterkonstante von 2500 nm

nur einige Nanometer des Siliziums abträgt. Der Einfluss auf die nachfolgende anisotrope Si-Ätzung in TMAH kann aus diesem Grund vernachlässigt werden.

Nach Entfernung der Lackmaske kann die anisotrope Ätzung des Siliziums mittels TMAH erfolgen. Verwendet wird eine TMAH-Lösung mit 25% Verdünnung bei einer Temperatur von 75°C . Die Ätzrate der $\{100\}$ -Ebenen liegt bei ca. $22\text{ }\mu\text{m/h}$ bzw. 370 nm/min . Gleichzeitig liegt die Ätzrate der $\{111\}$ -Stoppebenen bei 10 nm/min , folglich wird ein Ätzratenverhältnis von 37:1 erreicht. Die Ätzzeit wurde auf 4 min festgelegt. Dadurch wird eine Ätztiefe in $\{100\}$ -Ebenen von 1480 nm erzielt, die nach Gl. 5.11 für eine vollständige Öffnung von Gruben mit einer maximalen Breite b von 2090 nm ausreicht. Damit ist eine ausreichende Überätzung gesichert, da die größten Gruben eine Breite von 1500 nm erreichen sollen, um ein Gitter mit einer Gitterkonstante g von 2500 nm und einer Stegbreite s von 1000 nm generieren zu können. Die festgelegte Ätzzeit führt gleichzeitig zu einer weiteren Verbreiterung der Gruben und somit zu einer Unterätzung der Oxid-Hartmaske (s. Abb. 5.24). Sie ergibt sich aus der Ätzrate der $\{111\}$ -Stoppebenen und beträgt 40 nm pro Kante. Verglichen zum gezeichneten Design erhält man damit eine durch die Prozessierung begründete Verbreiterung der Grube von insgesamt 160 nm bei der nasschemischen Ätzung der Hartmaske bzw. 80 nm bei trockenchemischer Ätzung, die in den Strukturen der Chrommaske berücksichtigt werden müssen.

In einem abschließenden Schritt wird nun die Oxid-Hartmaske in gepufferter HF-Lösung entfernt, bevor mittels eines Dampfprozesses die reflektierende und 50 nm dicke Aluminiumschicht abgeschieden wird. Die Untersuchung der Gitterstrukturen kann aufgrund ihrer geringen Abmessungen nur im Raster-Elektronen-Mikroskop (REM) erfolgen. Trotz kalibrierter Messung sind dabei Messungenauigkeiten im Bereich von 50 nm zu akzeptieren. Es ist erkennbar, dass eine Stegbreite von 1000 nm bei einer Gitterkonstante von 2500 nm zielgenau erreicht wurde. Für die geringere Gitterkonstante von 1600 nm ist die Unterätzung der Oxid-Hartmaske deutlich zu erkennen. Die Stegbreite liegt nach Abzug der Unterätzung von 80 nm bei ca. 600 nm und damit knapp unter der gewünschten Breite von 650 nm . Es zeigt sich allerdings deutlich, dass die technologische Realisierung der Stegbreite sehr genau eingestellt werden kann und sich

im Bereich der Messgenauigkeit des Raster-Elektronen-Mikroskops befindet. Damit können die zuvor aus der Simulation berechneten Gitterstrukturen zielgenau im Prozess umgesetzt werden.

5.3.2 Herstellung sinusförmiger Gitterstrukturen

Wie bereits erwähnt, nutzt die Herstellung von sinusförmigen Gitterstrukturen die oben beschriebene trapezförmige Grundstruktur als Basis. Von Vorteil ist hierbei, dass diese Grundstruktur durch die kristallografischen Abhängigkeiten in engen technologischen Parametern hergestellt werden kann und somit eine ausgezeichnete Basis für den weiteren Aufbau bietet.

Ausgehend von trapezförmigen Gitterstrukturen ohne Verspiegelungsschicht wird eine mit 2%-iger Bor- und 4%-iger Phosphorkonzentration dotierte Oxidschicht (BPSG) auf die Basisstruktur abgeschieden. Verwendet wird dafür ein Plasma Enhanced CVD Prozess (PE-CVD), der eine konforme Abscheidung der Schicht ermöglicht. Durch die Dotanten im Oxid wird gleichzeitig die Schmelztemperatur des Oxids abgesenkt [79]. Eine folgende Ofentemperatur von 30 min bei 960°C schmilzt die Oxidschicht auf, wobei das Oxid in die v-förmigen Gruben der trapezförmigen Grundstruktur fließt. Es bildet sich dadurch eine sinusförmige Gitterstruktur aus, die mit einer aufgedampften Aluminiumschicht verspiegelt werden kann. Die Form der Sinusstruktur ist dabei maßgeblich von der trapezförmigen Basis, der Dicke und den Fließeigenschaften des Oxids abhängig. Um den zu untersuchenden Parameterraum zu begrenzen, wurde der Temperprozess bei der Entwicklung mit den oben angegebenen Einstellungen konstant gehalten. Die Optimierung konzentriert sich daher hauptsächlich auf die Einstellung einer für die Herstellung von sinusförmigen Gittern ideal angepassten trapezförmigen Grundstruktur. Ziel ist es, sinusförmige Gitterstrukturen zu entwickeln, die ein optimales Tiefen- zu Periodenverhältnis h/g von 0,35 aufweisen und gleichzeitig die Sinusform so genau wie möglich abbilden.

Um eine Optimierung der sinusförmigen Gitterstrukturen durch Prozessanpassungen zu erreichen, ist es zunächst erforderlich, die Zielvorgaben der Gitterstruktur genauer zu definieren. Eine der Grundvoraussetzungen ist die Symmetrie der Sinusform. Obere und untere Halbwelle des Sinus müssen dafür im gleichen Verhältnis von 1 : 1 stehen. Dies bedeutet, dass die Halbwertsbreite genau der halben Periode betragen muss mit $0,5 \cdot g$ bei $0,5 \cdot h$. Des Weiteren ist der Steigungswinkel τ des Sinus, bestimmt am Punkt der halben Strukturtiefe mit $0,5 \cdot h$ ein signifikanter Parameter (s. Abb. 5.25). Er lässt sich mit trigonometrischen Berechnungen aus der Sinusgleichung herleiten. Um Sinusformen mit unterschiedlicher Periode (Gitterkonstante) vergleichen zu können, ist es zweckmäßig, die Periode auf den Wert 1 zu normieren. Unter diesen Voraussetzungen lässt sich die ideale Sinusform mit einem Tiefen- zu Periodenverhältnis von 0,35 angeben zu

$$f(x) = \frac{0,35 \cdot g}{2} \cdot \sin\left(x \cdot \frac{2\pi}{g}\right) \quad (5.13)$$

Der Steigungswinkel τ bei $x = 0$ lässt sich folglich über die Ableitung von Gl. 5.13 bestimmen zu

$$\tau = \tan^{-1}\left(f'(0)\right) = \tan^{-1}\left(0,35 \cdot \pi \cdot \cos(0)\right) \quad (5.14)$$

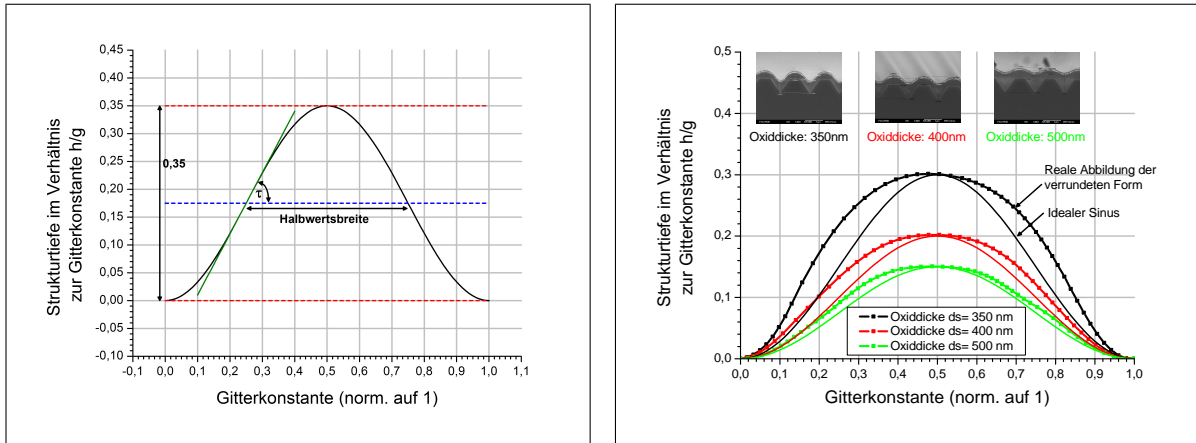


Abbildung 5.25: links: Signifikante Parameter zur Ausbildung einer idealen sinusförmigen Gitterstruktur; rechts: Sinusförmige Gitterstrukturen basierend auf trapezförmigen Grundstrukturen mit einer Gitterkonstante g von 1600 nm und einer Stegbreite s von 600 nm. Vergleich von idealen zu hergestellten, sinusförmigen Gitterstrukturen in Abhängigkeit der Oxiddicke d_S

Für die ideale Sinusform, normiert auf eine Periode von 1, ergibt sich somit ein Wert von $47,7^\circ$, wie in Abb. 5.25 gezeigt.

Um die prozesstechnisch bedingte Form der Oxidschicht der idealen Sinusform anzupassen, sind zunächst die Abscheidebedingungen genauer zu untersuchen. Die verwendete PE-CVD-Abscheidung des Oxids ergibt eine konforme Abscheidung der unterliegenden trapezförmigen Siliziumstruktur. Dabei ist die abgeschiedene Schichtdicke d_S abhängig vom Böschungswinkel ξ der Grundstruktur. Sie verhält sich nach einer Sinusabhängigkeit und kann allgemein beschrieben werden mit

$$d_{S,\xi} = d_S \cdot \sin(\xi) \quad (5.15)$$

Auf den Oberflächen der Stege scheidet sich die maximale Schichtdicke d_S ab, während an der durch die Kristallstruktur des Siliziums vorgegebenen Böschung der Trapezstruktur mit $\xi = 54,7^\circ$ die Schichtdicke um den Faktor $\sin(\xi)$ reduziert ist. Am Grubenboden wachsen die sich von beiden Seiten bildenden Oxid-Schichten zusammen und erreichen somit wieder die maximale Schichtdicke d_S . Dies ergibt sich auch aus trigonometrischer Betrachtung mit

$$d_{S,Grube} = \frac{d_S \cdot \sin(\xi)}{\cos(90^\circ - \xi)} = d_S \quad (5.16)$$

Die konforme PE-CVD-Abscheidung einer Oxidschicht ist an einer Teststruktur in Abb. 5.26 für eine maximale Schichtdicke d_S von 300 nm dargestellt. Differenzen gegenüber den hier hergeleiteten Werten sind durch Messabweichungen bestimmt, da sich das Oxid im Raster-Elektronen-Mikroskop statisch auflädt und die Kanten der Oxidoberfläche nicht genau erfasst werden können. Grundsätzlich gilt dies für alle hier dargestellten REM-Messungen von sinusförmigen Strukturen. Aus diesem Grund werden folgend die Messwerte im Text mit einer Genauigkeit von 50 nm an-

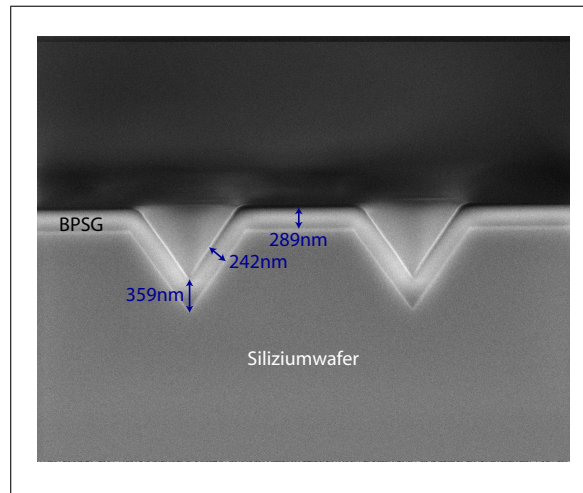


Abbildung 5.26: REM-Aufnahme einer BPSG-Schicht auf einer trapezförmigen Gitterstruktur, hergestellt durch einen konformen PE-CVD-Prozess

gegeben, in den Graphen sind dagegen die Rohdaten dargestellt. Alle Werte, auch die für diesen Fall aus Gl. 5.15 berechnete Schichtdicke $d_{S,\xi}$ an der Böschung mit 244 nm , werden trotzdem wie in der Messung zu erkennen bestätigt.

Betrachtet man nun die Fließeigenschaften des Oxids, ist zunächst zu beachten, dass die abgeschiedene Oxid-Schicht physikalisch als eingefrorene Schmelze zu betrachten ist. Während des Temperprozesses wird die Schmelztemperatur überschritten und das Oxid beginnt zu fließen. Treibende Kraft für die Formänderung des Oxids ist dabei nicht die Schwerkraft, da sie aufgrund der geringen Masse der Oxidschicht vernachlässigt werden kann. Vielmehr sind es Oberflächenkräfte, die von einer Minimierung der Grenzfläche des Oxids zur umgebenden Atmosphäre getrieben werden [80]. Das energetische Minimum ist erreicht, wenn die Oberfläche an der Grenzfläche zur umgebenden Atmosphäre auf ein absolutes Minimum reduziert ist. In erster Näherung wird davon ausgegangen, dass das Volumen der Oxidschicht dabei unverändert bleibt. Mathematisch wird das minimale Verhältnis einer Oberfläche zum Volumen bzw. eines Umfangs zur Fläche durch die isoperimetrische Ungleichung beschrieben [81]. Sie besagt, dass dieses Minimum durch die Kugelform bzw. den Kreis gegeben ist. Jede abweichende Form erhöht dieses Verhältnis. Wäre das Oxid also vollständig von der Atmosphäre umgeben, würde sich unter Vernachlässigung weiterer Kräfte eine Kugelform ausbilden.

Für die Betrachtung des abgeschiedenen Oxids ist zunächst zu beachten, dass die Adhäsionskräfte zum unterliegenden Silizium stärker sind als die wirkenden Oberflächenkräfte. Es kommt also zu keiner Zeit zu einer Ablösung des Oxids. Dies bedeutet, dass das energetische Minimum der Oxidform bei einer glatten Oberfläche erreicht ist, die sich über die gesamte abgeschiedene Fläche erstreckt.

Bei Analyse der Topologie des Oxids nach der PE-CVD-Abscheidung ergibt sich eine Topologie innerhalb der Gitterfläche lediglich quer zur Gitterstruktur. In diesem besonderen Fall kann die Formänderung des Oxids während der Temperung also auf ein 2-dimensionales Pro-

blem beschränkt werden. Wie bereits erwähnt, besitzt der Kreis im 2-dimensionalen Raum das minimalste Umfang-zu-Flächen-Verhältnis. Sein Umfang wird dabei durch die Sinusform beschrieben. Übertragen auf die Topologie des Oxids bedeutet dies, dass die Oberfläche bestrebt ist eine Sinusform anzunehmen und gleichzeitig die Amplitude zu verringern, bis dadurch eine glatte Oberfläche und damit das energetische Minimum erreicht ist. Die Sinusform bildet sich also aus energetischen Gründen aus und muss nicht zwingend durch die unterliegende trapezförmige Struktur vorgegeben werden.

Die Geschwindigkeit der Formveränderung hängt signifikant von der Temperatur und der Dauer des Ofenprozesses sowie von der Viskosität und der Schichtdicke des Oxids ab. Wie bereits erwähnt, wurden die Temperprozesse, wie auch die Zusammensetzung des Oxids und damit die Viskosität konstant gehalten, um den Parameterraum für die Entwicklung einzuschränken. Detaillierte Untersuchungen zu diesen Parametern wurden in dieser Arbeit deshalb nicht weiter verfolgt. Der Einfluss der Schichtdicke wurde allerdings als veränderlicher Parameter aus dieser Gruppe gewählt, und zur Entwicklung der sinusförmigen Gitterstrukturen verwendet. Zusammen mit der Variation der Stegbreite s , der Gitterkonstante g und der Grubenöffnung bzw. -tiefe schließt sie damit den zur Entwicklung verwendeten Parameterraum ab.

Um zunächst den Einfluss der Grubengröße zu untersuchen, wurden trapezförmige Gitterstrukturen mit einer Gitterkonstante von 1600 nm und 2500 nm und einer variierenden Stegbreite s hergestellt, auf die eine 300 nm dicke Oxid-Schicht abgeschieden und bei 960°C für 30 min getempert wurde. Trotz einer Variation der Grubenbreite von 950 nm bis 1450 nm (s. Abb. 5.27) zeigte sich unabhängig der Gitterkonstante, dass die Verrundung am Grubenboden für alle Varianten identisch ist. Dies gilt sowohl für die Füllhöhe am Grubenboden, die mit 450 nm gemessen wurde, wie auch für die sich ausbildende verrundete Form des Oxids in diesem Bereich. Der Steigungswinkel blieb unverändert und verläuft weiterhin parallel zum Böschungswinkel der tra-

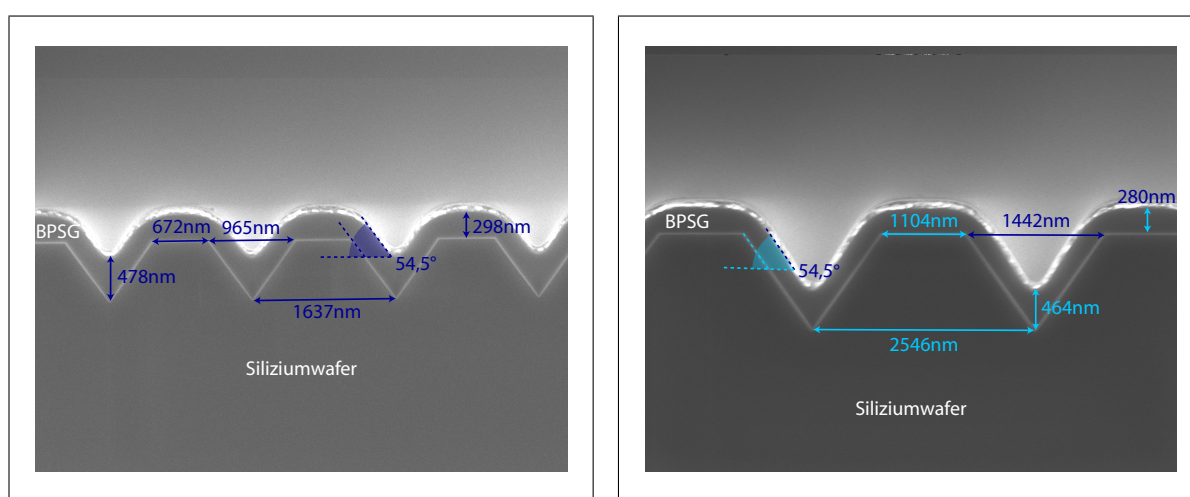


Abbildung 5.27: Einfluss der Grubengröße auf Formeigenschaften des BPSG nach Temperung bei 900°C und 30 min für eine Gitterkonstante von 1600 nm (links) und 2500 nm (rechts). Die BPSG-Schichtdicke im Grubenboden zeigt keine Abhängigkeit zur Grubengröße und Gitterkonstante

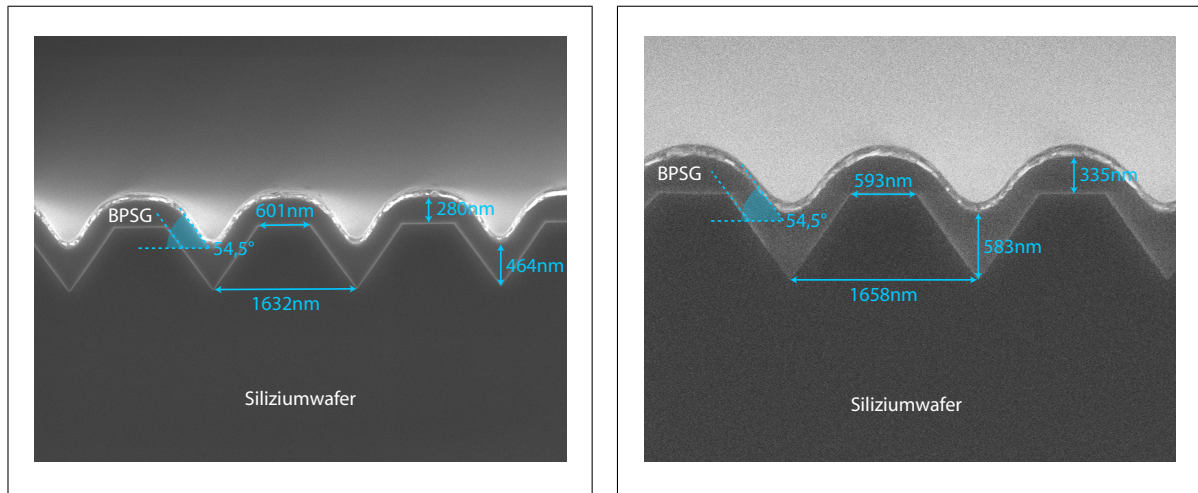


Abbildung 5.28: links: Sinusförmige Verrundung von BPSG bei einer Anfangsschichtdicke von 300 nm und einer Gitterkonstante von 1600 nm; rechts: Sinusförmige Verrundung von BPSG bei einer Anfangsschichtdicke von 350 nm und einer Gitterkonstante von 1600 nm

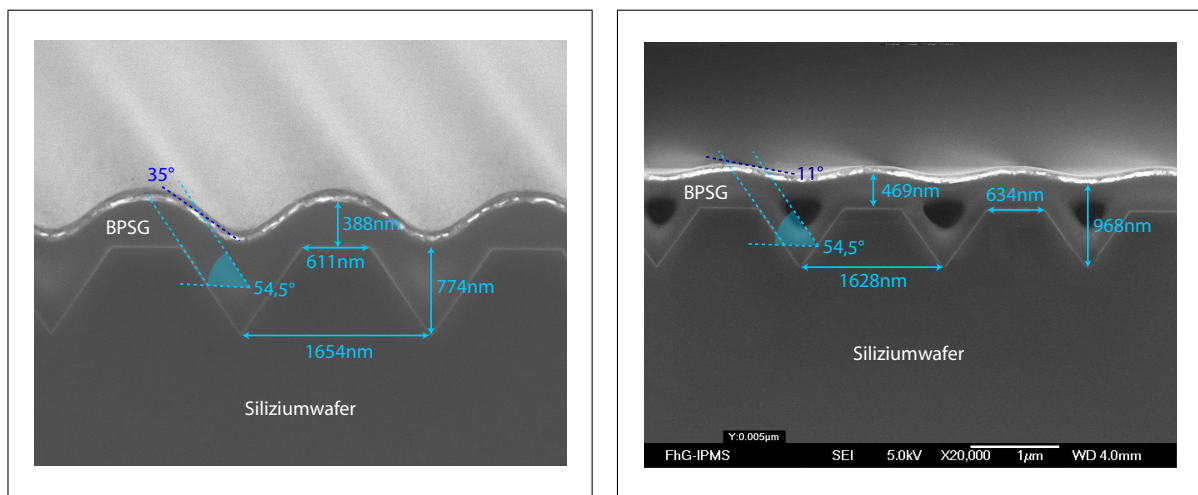


Abbildung 5.29: links: Sinusförmige Verrundung von BPSG bei einer Anfangsschichtdicke von 400 nm und einer Gitterkonstante von 1600 nm; rechts: Sinusförmige Verrundung von BPSG bei einer Anfangsschichtdicke von 500 nm und einer Gitterkonstante von 1600 nm

pezförmigen Grundstruktur mit 54,7°. Ebenfalls erkennbar ist, dass auch die Oxid-Schichtdicke auf dem Steg für alle Varianten unverändert bleibt. Allein an den konvexen Kanten erfolgt eine Verrundung der Grundstruktur.

Ableitend aus diesen Ergebnissen wurde für eine Gitterkonstante von 1600 nm und identischen Temperbedingungen (960°C, 30 min) die Oxid-Schichtdicke in Stufen von 300 nm, 350 nm, 400 nm und 500 nm variiert (s. Abb. 5.28/5.29). Dabei erhöht sich die Füllhöhe in den Gruben unter Berücksichtigung der Messgenauigkeit zunächst äquidistant um 150 nm pro 50 nm Zuwachs an Schichtdicke. Es ergeben sich somit Füllhöhen von 450 nm, 600 nm und 750 nm. Erst ab einer Schichtdicke von 500 nm sinkt der Zuwachs an Schichthöhe und erreicht einen redu-

zierten Wert von 950 nm. Grund hierfür ist, dass die Grube bei dieser Schichtdicke vollständig gefüllt ist und sich der weiterhin bestehende Höhenunterschied nun langsamer ausgleicht. Parallel wurden Vergleichsmessungen an veränderten Gitterkonstanten bis 2500 nm und auch an veränderten Grubenöffnungen getestet. Sie zeigten bei gleichen Oxiddicken dabei keine messbaren Unterschiede. Überschreitet die Füllhöhe also nicht die Grubenöffnung, so ist sie allein von der Schichtdicke des abgeschiedenen Oxids abhängig und wird nicht von der Größe der Grube oder der Gitterkonstante beeinflusst.

Betrachtet man den Steigungswinkel γ der sinusförmigen Struktur, so beginnt er sich zu ändern, sobald die Füllhöhe ca. 100 nm unterhalb der Grubenöffnung liegt. An diesem Punkt tritt neben der Minimierung des Höhenunterschieds nun auch die Angleichung zu einer idealen Sinusstruktur auf. In Abb. 5.25 sind die Realformen der erzeugten sinusförmigen Gitterstrukturen für eine Gitterkonstante von 1600 nm und einer Stegbreite von 600 nm bei gleichzeitig variierten Oxiddicken dargestellt. Es ist deutlich erkennbar, dass die reale Form sich mit steigender Oxiddicke der idealen Sinusform angleicht. Die normierte Halbwertsbreite der oberen Halbwelle c_o sinkt dabei von 0,62 über 0,58 auf 0,56 ab (ideale Sinusstruktur: 0,5). Allerdings verringert sich gleichzeitig auch die Gittertiefe. Sie erreicht bei bester Annäherung nur noch ein Verhältnis von Gittertiefe zu Gitterkonstante h/g von 0,2 (Zielwert aus Simulation: 0,35).

Um die Struktur weiter zu optimieren und sich weiter an die aus der Simulation berechneten Werte (h/g : 0,35, normierte Halbwertsbreite: 0,5) anzunähern, sind deshalb zusätzliche Anpassungen notwendig. Zum Einen muss die Stegbreite minimiert werden, um die Halbwertsbreite schon vor Beginn der Temperung hinsichtlich der zu erreichenden Sinusstruktur zu verbessern. Gleichzeitig muss die Oxiddicke weiter erhöht werden, da mit einer Verringerung der Stegbreite auch die Grubentiefe der trapezförmigen Grundstruktur steigt. Ideal wären aus diesem Grund Strukturen mit einer Stegbreite von ca. 100 nm bis 300 nm und einer Oxiddicke von ca. 500 nm bis 700 nm.

Es zeigt sich zusammenfassend, dass die Herstellung von sinusförmigen Gitterstrukturen, die die simulierten Ziel-Werte so gut als möglich erfüllen, nur durch eine genaue Prozesskontrolle und hohem Optimierungsaufwand erreicht werden kann. Im Vergleich zu trapezförmigen wie auch geblazten Gitterstrukturen sind die Anforderungen folglich deutlich anspruchsvoller. Dies ist insbesondere für ausbeuterelevante Aspekte der Gitterherstellung zu beachten.

5.3.3 Herstellung von geblazten Gitterstrukturen

Der Herstellungsprozess von geblazten Gittern ist identisch zu den zuvor beschriebenen trapezförmigen Gitterstrukturen. Die unterschiedliche Ausbildung der Ätzgrube ist allein durch die Kristallorientierung des verwendeten Siliziummaterials vorgegeben. Da diese Sondersubstrate nur schwer gewerblich erhältlich sind, musste der grundsätzliche Nachweis der Herstellbarkeit mit Substraten durchgeführt werden, die eine Siliziumoberfläche mit 9° Kippung zur {111}-Stoppebene aufweisen. Dies entspricht gleichzeitig einem Blazewinkel von 9°.

Wie bereits in den Simulationen (vgl. Kap. 5.2.3) gezeigt, können mit diesem Blazewinkel nicht die für die Zielspezifikationen des miniaturisierten NIR-Spektrometers notwendigen Gitterkon-

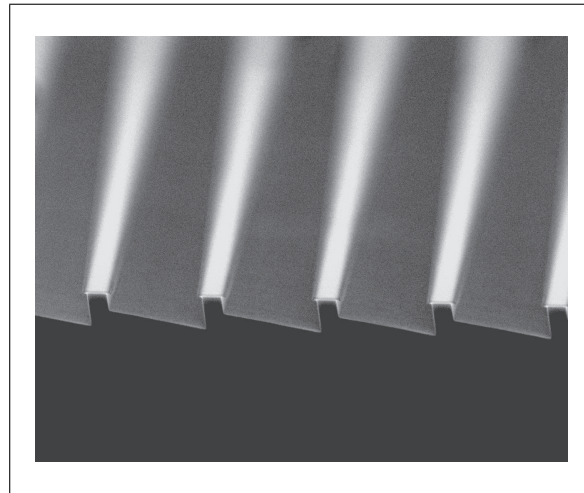


Abbildung 5.30: REM-Aufnahme einer hergestellten, geblazten Gitterstruktur bei einer Gitterkonstante von 3650 nm und einem Blazewinkel von 9°

stanten erreicht werden, die nur mit Blazewinkeln von 22° bzw. 25° realisiert werden können. Stattdessen ergeben sich für eine optimale Beugungseffizienz nun erhöhte Gitterkonstanten von 3650 nm für den Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm bzw. 5650 nm für den Wellenlängenbereich von 1250 nm - 2500 nm . Ein Einsatz im miniaturisierten NIR-Spektrometer ist somit nur bei Anpassung des Blazewinkels sinnvoll, die grundsätzliche Machbarkeit der Herstellung konnte aber trotzdem nachgewiesen werden.

In Abb. 5.30 ist eine REM-Aufnahme einer hergestellten, geblazten Gitterstruktur dargestellt. Die Ausformung der geblazten Strukturen ist durch die Lage der $\{111\}$ -Stoppebenen im Substrat vorgegeben. Die Ätzung stoppt vergleichbar zu trapezförmigen Gitterstrukturen selbstständig. Die Stegbreite wird durch die Strukturabmessungen der Hartmaske vorgegeben, durch eine nachfolgende, gezielte Überätzung in TMAH kann zusätzlich eine Feinjustage der Stegbreite realisiert werden.

Vergleichbar zu trapezförmigen Gitterstrukturen ist auch in diesem Fall die Prozesskontrolle einfach. Die zuvor simulierten Strukturen können bei Verfügbarkeit der speziellen Kristallorientierungen in hoher Genauigkeit nachgebildet und in den Prozess abgebildet werden.

5.3.4 Entwicklung spezieller Kontrollstrukturen zur Prozessüberwachung

Alle zur Entwicklung der Gitterstrukturen bereits beschriebenen Analysen wurden mit Hilfe von Messungen am Raster-Elektronen-Mikroskop durchgeführt. Diese Analysen erfordern die Zerstörung der Gitterstrukturen durch gezielte Brüche und einen erheblichen, nicht automatisierbaren Messaufwand. Um diesen Aufwand in der Herstellung mikromechanischer Beugungsgitter zu minimieren, wurden geeignete Kontrollstrukturen entwickelt, die zerstörungsfrei verwendet werden können und durch eine rein visuelle Inspektion mittels Mikroskopie ausgewertet werden.

In Abb. 5.31 sind Kontrollstrukturen zur Überwachung der erreichten Ätztiefe in Gruben ab-

gebildet. Dazu werden quadratische Öffnungen in eine Oxidmaske geätzt, deren Kantenlänge von $0,6\ \mu\text{m}$ bis $5,8\ \mu\text{m}$ mit einer Schrittweite von $200\ \text{nm}$ variiert. Um die Größe der Öffnungen leicht ablesen zu können, sind Nonien in Form von kleinen Quadraten an der Unterseite der Kontrollstruktur eingebracht. Jede Spalte der Struktur beginnt von unten nach oben mit einem Zuwachs der Kantenlänge von $0\ \text{nm}$ bis $800\ \text{nm}$ bei einer Schrittweite von $200\ \text{nm}$. Von links nach rechts erhöht sich die Kantenlänge pro Spalte um jeweils $1000\ \text{nm}$.

Während der Gitterstrukturierung mittels TMAH werden auch die offenliegenden Kontrollstrukturen in die Tiefe geätzt. Je größer die Kantenlänge, desto länger die Ätzzeit, bis die quadratischen Öffnungen nur noch von $\{111\}$ -Stoppebenen begrenzt sind. Nicht vollständig geöffnete Kontrollstrukturen sind am Boden von einer zurückbleibenden $\{100\}$ -orientierten Ebene begrenzt. Im Streulicht des Mikroskops sind diese Ebenen deutlich als helle Lichtpunkte erkennbar (s. Abb. 5.31). Vollständig frei geätzte Öffnungen erscheinen dagegen dunkel, da die $\{111\}$ -Stoppebenen in einem Winkel von $54,7^\circ$ zur Oberfläche geneigt sind. Die Ätztiefe liegt daher genau zwischen der größten, vollständig geätzten quadratischen Öffnung und der Folgenden und kann damit rein optisch auf einen Wert mit einer Genauigkeit von $200\ \text{nm}$ bestimmt werden. So kann die absolute Ätztiefe vermessen und gleichzeitig sichergestellt werden, dass die hergestellten Gitterstrukturen vollständig geöffnet sind.

Die Kontrolle der Unterätzung der Hartmaske bei der Gitterstrukturierung, die maßgeblich die Einstellung der Stegbreite ermöglicht, ist ein weiterer wichtiger Parameter für die Herstellung mikromechanischer Beugungsgitter. Hierzu wurde eine Kontrollstruktur entwickelt, die in Abb. 5.32 dargestellt ist. Sie besteht aus Bereichen sich gegenüberstehender, geöffneter Balkenstrukturen, deren Abmessung der Grubenbreite b der Gitterstruktur, festgelegt durch die Oxid-Hartmaske, entspricht. Die gegenüberliegenden Balkenstrukturen haben an ihren Enden einen durch das Design festgelegten Abstand zueinander, beginnend von $0\ \text{nm}$ bis $400\ \text{nm}$, der sich in $40\ \text{nm}$

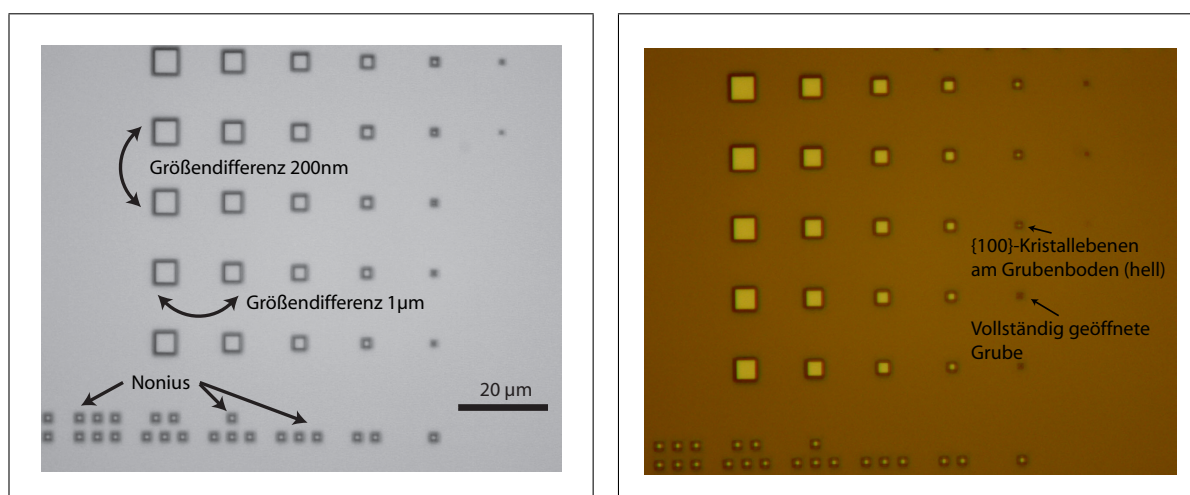


Abbildung 5.31: links: Funktionsweise und Skala der entwickelten Kontrollstruktur zur mikroskopischen Überwachung der anisotropen Ätztiefe durch nasschemisches Ätzen von einkristallinem Silizium mittels TMAH; rechts: Bewertbare Kontrollstruktur nach Ätzung im Mikroskop. Vollständig geöffnete Quadrate erscheinen durch die Lage der $\{111\}$ -Kristallebenen dunkel, sonstige durch die am Grubenboden verbleibende $\{100\}$ -Kristallebene hell

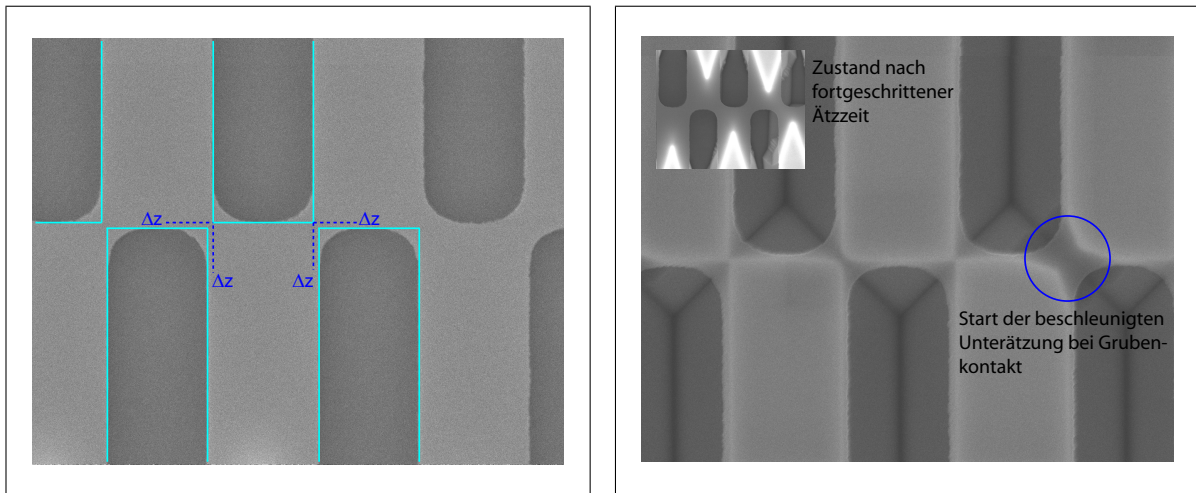


Abbildung 5.32: links: Strukturierte Oxid-Hartmaske der Kontrollstruktur zur mikroskopischen Überwachung der lateralen Unterätzung mit konstanten Abständen Δz ; rechts: REM-Aufnahme nach der nasschemischen, anisotropen Ätzung in TMAH. Durch die laterale Ätzung der $\{111\}$ -Kristallebenen berühren sich gegenüberliegende Gruben, die Ätzrate steigt an diesen Stellen sprunghaft an. Freigelegte Bereiche erscheinen dunkel, helle Bereiche sind noch nicht unterätzt

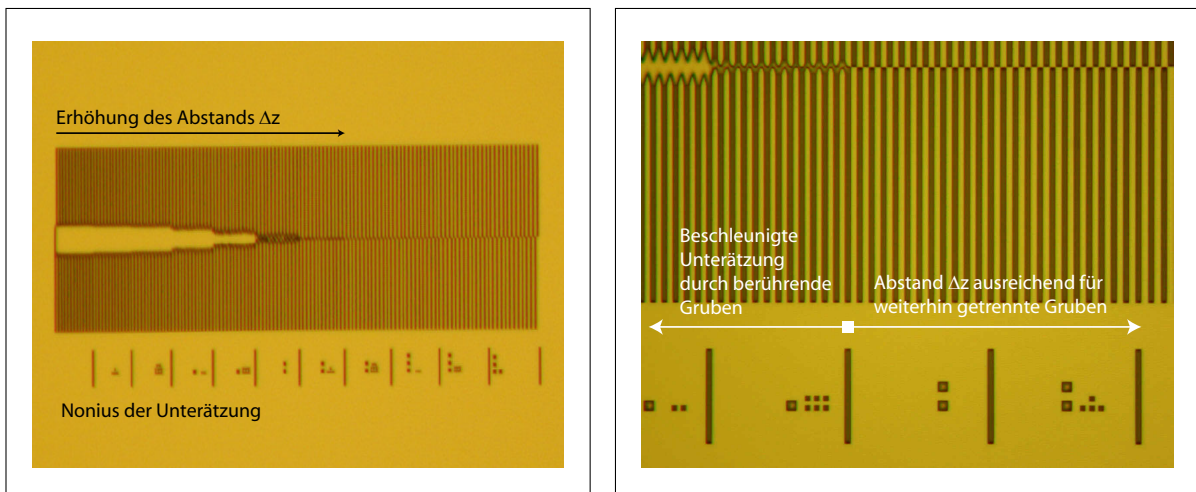


Abbildung 5.33: links: Mikroskopaufnahme nach der nasschemischen, anisotropen Ätzung in TMAH. Der Nonius kennzeichnet die Abstände lateraler Unterätzung Δz , in ansteigenden Schritten von 40 nm. In hellen Bereichen ist die Ätzung fortgeschritten, die laterale Unterätzung ist mikroskopisch sichtbar; rechts: Mikroskopische Nahaufnahme des messtechnisch relevanten Bereichs zur Bestimmung der lateralen Unterätzung

Abschnitte unterteilt. Zur optischen Begutachtung ist an der unteren Seite der Kontrollstruktur wiederum ein Nonius mit quadratischen Öffnungen eingefügt. Große Quadrate stehen dabei für einen Abstand in je 100 nm Schritten, kleine für je 10 nm Schritte. Damit ist der Abstand der Balkenstrukturen optisch im Mikroskop ablesbar.

Äquivalent zu den Gitterstrukturen, werden die Balkenstrukturen der Kontrollstruktur mit der

Ätzrate der $\{111\}$ -Stoppebenen unterhalb der Oxid-Hartmaske verbreitert. Berühren sich nun die gegenüberliegenden Balkenstrukturen durch die fortschreitende Unterätzung der Oxid-Hartmaske, so entstehen konvexe Ecken, die für die TMAH-Lösung Bereiche unterschiedlichster Kristallorientierung darstellen. Dadurch erhöht sich die Ätzrate des Siliziums schlagartig, die Unterätzung steigt deutlich an und die Stege zwischen den Balkenstrukturen werden beschleunigt angegriffen und entfernt. So entstehen Bereiche erhöhter Reflektivität im Vergleich zu weiterhin getrennten und durch $\{111\}$ -Ebenen begrenzten Balkenstrukturen, die im Mikroskop bewertet werden können. Die zu bestimmende Unterätzung liegt somit genau zwischen Bereichen mit und gerade noch ohne optisch erkennbaren Ätzangriff. Sie kann also mit einer Genauigkeit von nur 40 nm im Mikroskop bestimmt werden (s. Abb. 5.33). Da diese Kontrollen zerstörungsfrei durchgeführt werden, ist grundsätzlich auch eine Nachätzung als Prozessstabilisierung möglich. Gezielte Stegbreiten mit einer Genauigkeit von 40 nm Toleranz in der Breite können so mit geringem Aufwand kontrolliert hergestellt werden.

5.3.5 Eigenschaften der Aluminium-Verspiegelungsschicht

Die Aluminiumschicht, die als Verspiegelung auf die Gitterstrukturen aufgebracht wird, ist durch eine Siliziumoxid-Dünnschicht gekapselt und wird durch einen Elektronen-Bedampfungsprozess abgeschieden. Dieser Prozess ist nahezu konform, die abgeschiedene Aluminiumschicht gleicht sich so ideal der Grundstruktur des Gitters an. Um eine möglichst hohe Effizienz der Gitter zu realisieren, muss die Dicke der Schicht so abgestimmt sein, dass sie für den eingesetzten Wellenlängenbereich von 900 nm bis 2500 nm optisch dicht ist und eine möglichst hohe Reflektivität aufweist. Dies muss insbesondere unter den verwendeten Einfallswinkeln α zwischen 7° und 27° gegeben sein (vgl. Tab. 4.4). Hierfür wurden Simulationen in Abhängigkeit des Einfallswinkels und der Aluminiumschichtdicke durchgeführt (s. Abb. 5.34). Während Änderungen des Einfallswinkels keinen Einfluss auf die Reflektivität zeigen, sinkt die Reflektivität signifikant unterhalb

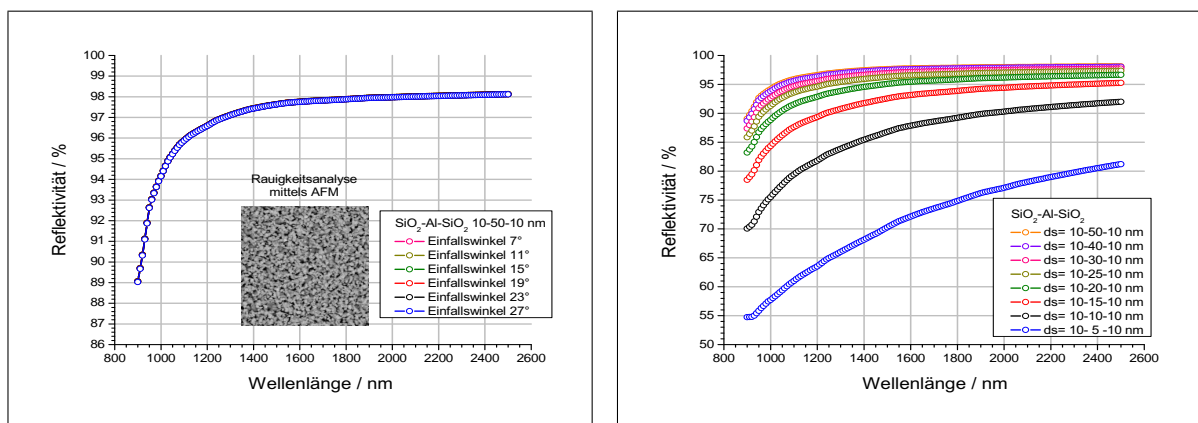


Abbildung 5.34: links: Simulierte Reflektivität der Aluminium-Verspiegelungsschicht in Abhängigkeit der Wellenlänge und des Einfallswinkels entsprechend dem im miniaturisierten NIR-Spektrometer verwendeten Messwinkelbereich α_{\min} bis α_{\max} . Eine Veränderung der Reflektivität innerhalb der hier gewählten Parameter ergibt sich nicht; rechts: Simulierte Reflektivität der Aluminium-Verspiegelungsschicht in Abhängigkeit der Wellenlänge und der Aluminiumschichtdicke d_s für einen festen Einfallswinkel α . Die Reflektivität sinkt erst signifikant unterhalb einer Dicke von 20 nm .

einer Aluminiumschichtdicke von 30 nm. Um eine hohe Reflektivität zu sichern und gleichzeitig einen ausreichenden Puffer für Prozessschwankungen zu gewährleisten, wurde deshalb die Aluminiumschichtdicke auf 50 nm festgelegt.

Zusätzlich wurde die Rauigkeit von hergestellten trapezförmigen Gitterstrukturen mit Aluminium-Verspiegelung mithilfe eines Atomic Force Microscopes (AFM) vermessen. Dafür wurde eine Fläche von 25 μm^2 abgetastet und die Oberflächenrauigkeit bestimmt (s. Abb. 5.34). Maßgebend für die Rauigkeit ist der Aluminium-Siliziumoxid-Stapel, da das unterliegende Silizium durch den Ätzstopp auf den {111}-Kristallebenen eine nahezu ideal glatte Oberfläche aufweist. Für den Stapel ergibt sich ein gemessener RMS-Wert der Oberflächenrauigkeit von 2,5 nm. Für die Geringste zur Messung eingesetzte Wellenlänge von 900 nm ist dies ein Faktor von 360, Einflüsse durch optische Streuung können somit in guter Näherung vernachlässigt werden.

5.3.6 Herstellungsprozess mikromechanischer Beugungsgitter

Die Herstellung der mikromechanischen Beugungsgitter basiert auf einem weiterentwickelten Prozess für resonante Mikrospiegel [52]. Zur Realisierung der mikromechanischen Beugungsgitter sind allerdings signifikante Anpassungen an den Herstellungsprozess notwendig, der die speziellen Anforderungen zur technologischen Integration der Gitterstrukturen berücksichtigt und erfüllt. Ziel ist die Integration aller drei in dieser Arbeit vorgestellten Gittervarianten in den Fertigungsprozess.

Die Herstellung startet mit 675 μm dicken Silicon-On-Insulator Wafern (SOI), deren einkristalline Deckschicht eine Dicke von 30 μm aufweist (s. Abb. 5.35-1). Die Deckschicht ist mit Bor dotiert bei einem spezifischen Widerstand von 0,025 Ωcm , um einen ausreichenden elektrischen Kontakt zu gewährleisten. In einem ersten Schritt werden mittels tiefem reaktiven Ionenätzen (DRIE) Gräben mit einer Breite von 1 μm durch die Deckschicht geätzt [82], [83]. Die Grabenätzung stoppt selektiv auf der vergrabenen Oxidschicht und stellt somit die elektrische Isolation zwischen Bereichen unterschiedlicher Potenziale auf dem Chip sicher (s. Abb. 5.35-2). Eine folgende Ofenoxidation, bei der eine Oxidschicht mit einer Dicke von 180 nm erzeugt wird, sichert eine homogene Isolation. Durch eine 1000 nm dicke Polysilizium-Schicht, abgeschieden mittels Low-Pressure CVD, werden die Gräben gefüllt ohne die Isolationseigenschaft zu beeinträchtigen (s. Abb. 5.35-3).

Um das abgeschiedene Polysilizium von der Waferoberfläche zu entfernen, wird ein Chemical-Mechanical-Polishing (CMP) Prozess verwendet, der selektiv zur unterliegenden Oxidschicht stoppt. Dieses Oxid wird anschließend nasschemisch durch eine gepufferte Flusssäure-Lösung (HF) entfernt (s. Abb. 5.35-4). Es folgt die Herstellung der Gitterstrukturen, indem zunächst eine 90 nm dicke Oxidschicht als Ätzhartmaske aufgebracht wird. Mittels eines RIE-Prozesses wird sie selektiv zur unterliegenden Deckschicht aus einkristallinem Silizium strukturiert und dabei der Bereich des Beugungsgitters festgelegt. Durch eine TMAH-Ätzung von ca. 4 min werden die trapezförmigen Gitterstrukturen, wie bereits in Kap. 5.3.1 beschrieben, in die Deckschicht übertragen. Die Hartmaske wird anschließend in einer nasschemischen HF-Lösung entfernt (s. Abb. 5.35-5a).

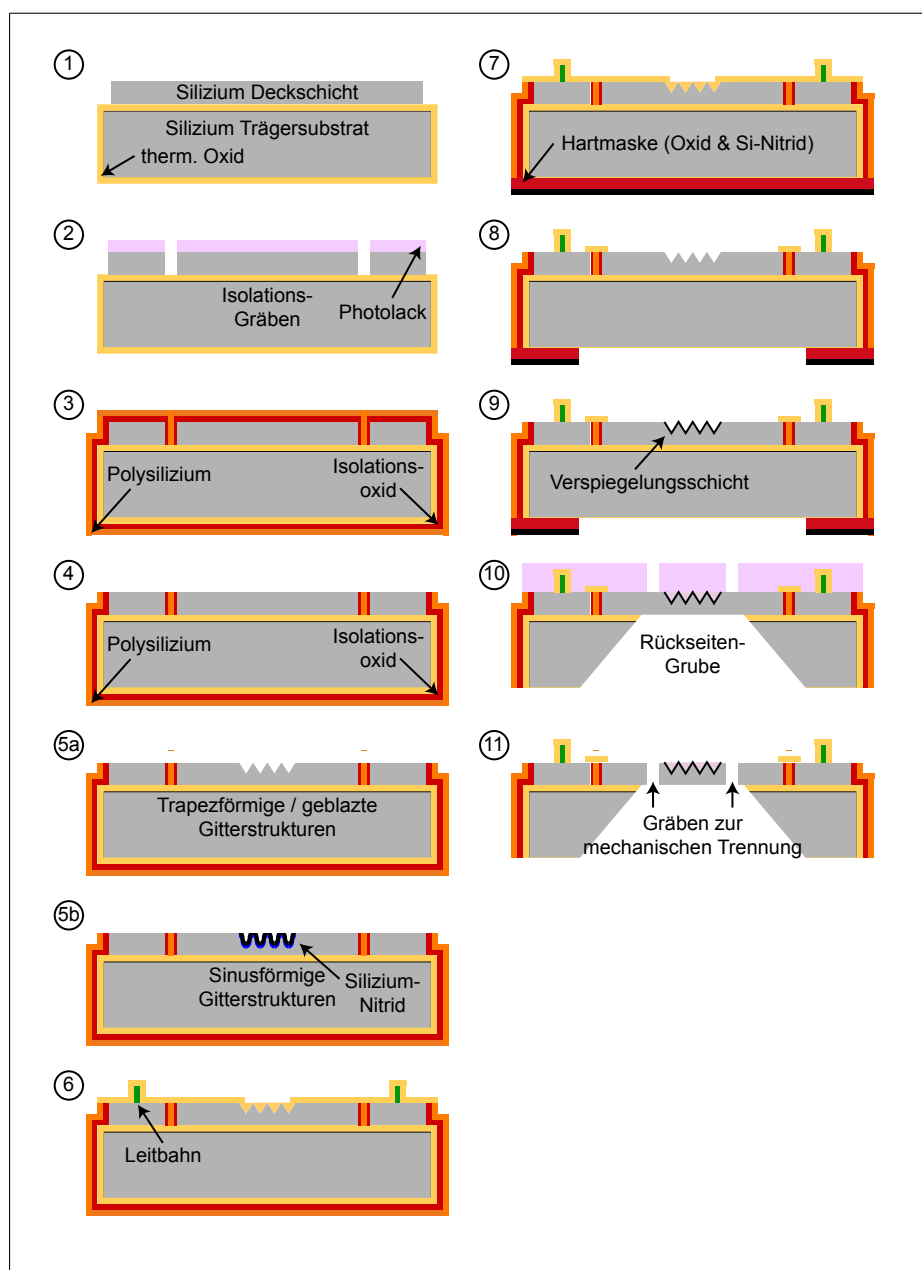


Abbildung 5.35: Prozessablauf zur Herstellung mikromechanischer Beugungsgitter

Im Fall von sinusförmigen Gitterstrukturen folgt hier ein technologischer Einschub durch eine weitere PE-CVD Abscheidung des bor- und phosphordotierten Oxids mit anschließender Temperung (s. Kap. 5.3.2). Um das formgebende Oxid vor nachfolgenden Prozessschritten zu schützen, wird zusätzlich Siliziumnitrid (Si_3N_4) als Schutzschicht abgeschieden. Die Gitterstrukturen werden mithilfe einer weiteren PE-CVD Oxid-Hartmaske geschützt, die restliche auf dem Wafer befindliche Nitridschicht wird in Phosphorsäure geätzt. Die Oxid-Hartmaske wird abschließend durch eine HF-Lösung vollständig entfernt. Damit ist der Einschub für die Herstellung von si-

nusförmigen Gitterstrukturen abgeschlossen (s. Abb. 5.35-5b).

Nach einer weiteren Abscheidung von 650 nm PE-CVD Oxid, die als Isolationsschicht der späteren Metallleitbahnen zur Deckschicht aus einkristallinem Silizium dient, erfolgt die Strukturierung der Kontaktfenster. Hierzu wird die Oxidschicht durch einen RIE-Prozess an den Kontaktstellen zur Deckschicht geöffnet. Durch einen Sputterprozess von 700 nm dickem Aluminium und einen trockenchemischen RIE-Prozess werden die Kontakte, die Metallleitbahnen und die Bondpads auf dem Chip generiert. In diesem Stadium ist eine elektrische Kontrolle der Leitbahnen und auch der Isolationsgräben möglich, um die elektrische Funktionalität des Chips zu überprüfen. Abschließend wird eine weitere 400 nm dicke PE-CVD Oxidschicht abgeschieden, die die Leitbahnen verkapselt und sie vor umweltbedingten Einflüssen im Betrieb des Chips schützt (s. Abb. 5.35-6).

Vorbereitend für den nächsten Prozessschritt, wird die Vorderseite mit einer Lackschicht überzogen und mittels einer Temperung bei 160°C ausgehärtet. Die Rückseite der Wafer wird folgend auf eine Dicke von ca. 400 µm zurückgeschliffen, wobei alle auf der Rückseite befindlichen Restschichten, die durch Ofen- und LP-CVD-Prozesse abgeschieden wurden, ebenfalls entfernt werden. Die Lackmaske auf der Vorderseite der Wafer wird durch einen Plasmaschritt rückstandslos geätzt. Wiederum auf die Rückseite wird nun ein für die folgende Rückseitenstrukturierung benötigte Hartmaske aus PE-CVD Oxid und PE-CVD Nitrid aufgebracht (s. Abb. 5.35-7).

In einem folgenden Schritt wird die Gitteroberfläche, die durch Oxid der verwendeten Kapselung der Metallleitbahnen bedeckt ist, mit einer nasschemischen Ätzung in HF-Lösung freigelegt. Diese Ätzung stoppt bei trapezförmigen Gitterstrukturen selektiv zum Silizium der Deckschicht, bei sinusförmigen Gitterstrukturen selektiv zur Siliziumnitridschicht, die aus diesem Grund zuvor im Herstellungsprozess als Schutz der unterliegenden verrundeten bor- und phosphordotierten Oxidschicht abgeschieden wurde. Folgend wird die auf der Rückseite befindliche Hartmaske durch einen RIE-Prozess strukturiert (s. Abb. 5.35-8) und dadurch in Bereichen unterhalb der später beweglichen Gitterspiegelplatte geöffnet.

In einem Bedampfungsschritt wird auf der Vorderseite eine 50 nm dicke Aluminium-Verspiegelungsschicht aufgebracht und durch einen nasschemischen Ätzprozess in HF-Lösung von der restlichen Oberfläche des Wafers entfernt (s. Abb. 5.35-9). Das durch die Kapselung verbliebene Oxid wird auf der Chipoberfläche mit Ausnahme der Leitbahnen durch einen RIE-Prozess beseitigt. Es wird eine Lackschicht aufgebracht, die für die später folgende Tiefenätzung der Gräben zur mechanischen Freilegung der beweglichen Gitterspiegelplatte benötigt wird. Der Wafer wird in eine nur zur Rückseite geöffneten Teflonbox eingebaut, um die empfindliche Lackschicht auf der Vorderseite für den folgenden nasschemischen Ätzprozess zu schützen.

In TMAH wird das Trägersubstrat des Wafers an den durch die Rückseiten-Hartmaske definierten Bereichen anisotrop bis zur vergrabenen Oxidschicht geöffnet. Das nun freigelegte Oxid wird anschließend in einer gepufferten HF-Lösung entfernt (s. Abb. 5.35-10). Die Wafer werden dann aus der Teflonbox ausgebaut. Die auf der Vorderseite befindliche Lackmaske nutzend, werden die Gräben zur mechanischen Freilegung der Gitterspiegelplatte mittels DRIE durch die Deckschicht aus einkristallinem Silizium geätzt. Damit ist der Fertigungsprozess abgeschlossen und die Chips sind nun voll einsatzfähig (s. Abb. 5.35-11). Durch einen speziell angepassten Waferprober

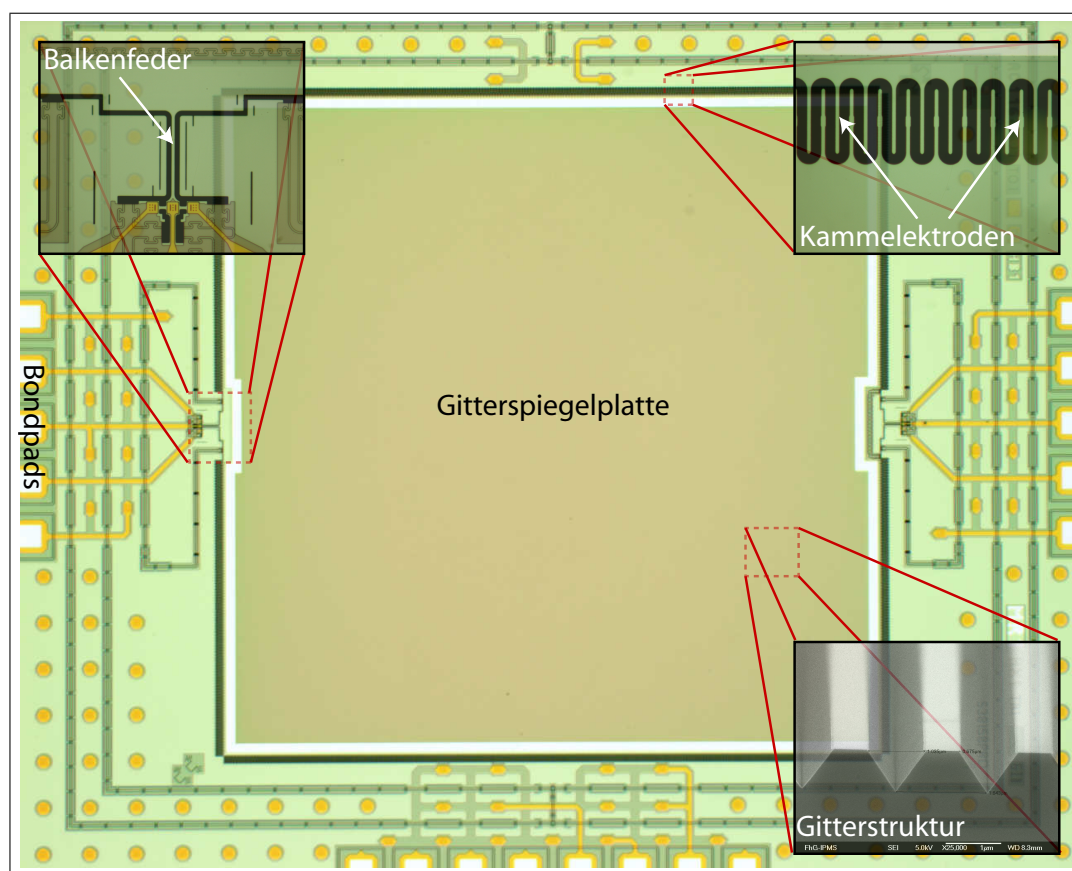


Abbildung 5.36: Mikroskopische Aufnahme eines gefertigten mikromechanischen Beugungsgitters mit einer quadratischen Gitterspiegelplatte von $3 \times 3 \text{ mm}^2$. Vergrößert: REM-Aufnahmen von einer Balkenfeder, der Kammelektroden und der Gitterstruktur

können sie in noch ungesägtem Zustand auf die elektrische und mechanische Funktionsfähigkeit getestet werden und somit Chips für den folgenden Vereinzelungs- und Aufbauprozess selektiert werden.

Vergleichbar zu den hier beschriebenen trapezförmigen Gitterstrukturen können ohne Prozessänderungen auch geblazte mikromechanische Beugungsgitter hergestellt werden. Zu beachten ist dabei allerdings, dass die Oxidationsrate des Siliziums von der Kristallrichtung abhängig ist, und die Oxidationsprozesse deshalb der höheren Rate [84] anzupassen sind. Zudem führt die Verwendung von Wafern mit spezieller Kristallorientierung zu einer Änderung des mittleren Schubmoduls G_m in der Balkenfeder (vgl. Kap. 4.1), das bei der Dimensionierung des mikromechanischen Beugungsgitters berücksichtigt werden muss. Auf die sonstige Fertigung, inklusive der DRIE-Prozesse, hat die veränderte Kristallorientierung an der Siliziumoberfläche keinen Einfluss.

In Abb. 5.36 ist ein Bild eines gefertigten mikromechanischen Beugungsgitters dargestellt. Die mikroskopische Aufnahme zeigt die Oberfläche des Chips in einer Vergrößerung mit Faktor 2,5. Der Federbereich, die gefertigten Antriebselektroden, wie auch die Gitterstrukturen sind vergrößert abgebildet.

6 Charakterisierung

In diesem Kapitel werden die hergestellten mikromechanischen Beugungsgitter hinsichtlich der optischen und mechanischen Eigenschaften charakterisiert. Dies beinhaltet die Messung der spektralen Beugungseffizienz, der Planarität der Gitterspiegelplatte als auch die Schwingungseigenschaften, die Amplitude, die Frequenz und Untersuchungen zur mechanischen Schockbelastung. Alle hier aufgeführten Aspekte werden sowohl an den Daten der vorangegangenen Dimensionierung gespiegelt als auch auf Konsistenz mit den festgelegten Zielspezifikationen untersucht.

6.1 Optische Analyse der mikromechanischen Beugungsgitter

6.1.1 Spektrale Beugungseffizienz

Eine der wichtigsten Eigenschaften der hergestellten mikromechanischen Beugungsgitter ist die erreichte, spektrale Beugungseffizienz. Hierzu wurde speziell ein Messaufbau konzipiert und realisiert, der eine detaillierte Messung ermöglicht (s. Abb. 6.1). Um die Messergebnisse und damit die spezifischen Eigenschaften der hergestellten Gitter mit Referenzgittern bzw. Werten aus der Literatur vergleichen zu können, ist es wichtig, die allgemeinen Definitionen der Beugungseffizienz einzuhalten (vgl. Kap. 5.2). Dies bedeutet für die Messung, dass sowohl Messabweichungen, hervorgerufen durch den Messaufbau, als auch Abweichungen durch die Begrenzung der Gitterfläche auf 3 mm aus der Effizienzberechnung auszunehmen sind. Auf diesen Umstand wird noch im Weiteren des Kapitels eingegangen.

Der optische Messaufbau (s. Abb. 6.2) besteht aus einem Monochromator, der monochromatisches Licht im Bereich von 300 nm bis 3000 nm bei einer maximalen Auflösung von 2 nm zur Verfügung stellen kann. Am Ausgang des Monochromators ist ein Chopper-Rad installiert, dass das Licht mit einer festgelegten Frequenz von 250 Hz moduliert, indem es die Lichtquelle zeitweise abschattet. Im Anschluss befindet sich ein parabolischer Off-Axis-Spiegel, der ohne chromatische Abberationen das Lichtstrahlbündel auf einen Durchmesser von ca. $2,5\text{ mm}$ kollimiert. Damit ist das Lichtstrahlbündel kleiner als die minimal beleuchtbare effektive Gitterfläche von $2,67\text{ mm}$ (vgl. Abb. 4.3). Eine Beleuchtung außerhalb der Gitterfläche ist damit zu jedem Zeitpunkt ausgeschlossen (Streulichtminimierung).

Um die Effizienz der beiden Polarisationsrichtungen (TE, TM) messen zu können, wurde folgend ein Polarisator in den optischen Strahlengang integriert, der wahlweise auf die zu messende Polarisationsrichtung eingestellt werden kann. Im Anschluss befindet sich ein Strahlteiler, der einen Teil des Lichts unter einem Winkel von 90° auf einen Referenz-Fotodetektor DB ablenkt. Das restliche Licht trifft auf das zu vermessende Gitter des mikromechanischen Beugungsgitters, der seinerseits auf einem programmierbaren Drehtisch mit xyz-Feinjustage eingebaut ist. Das vom

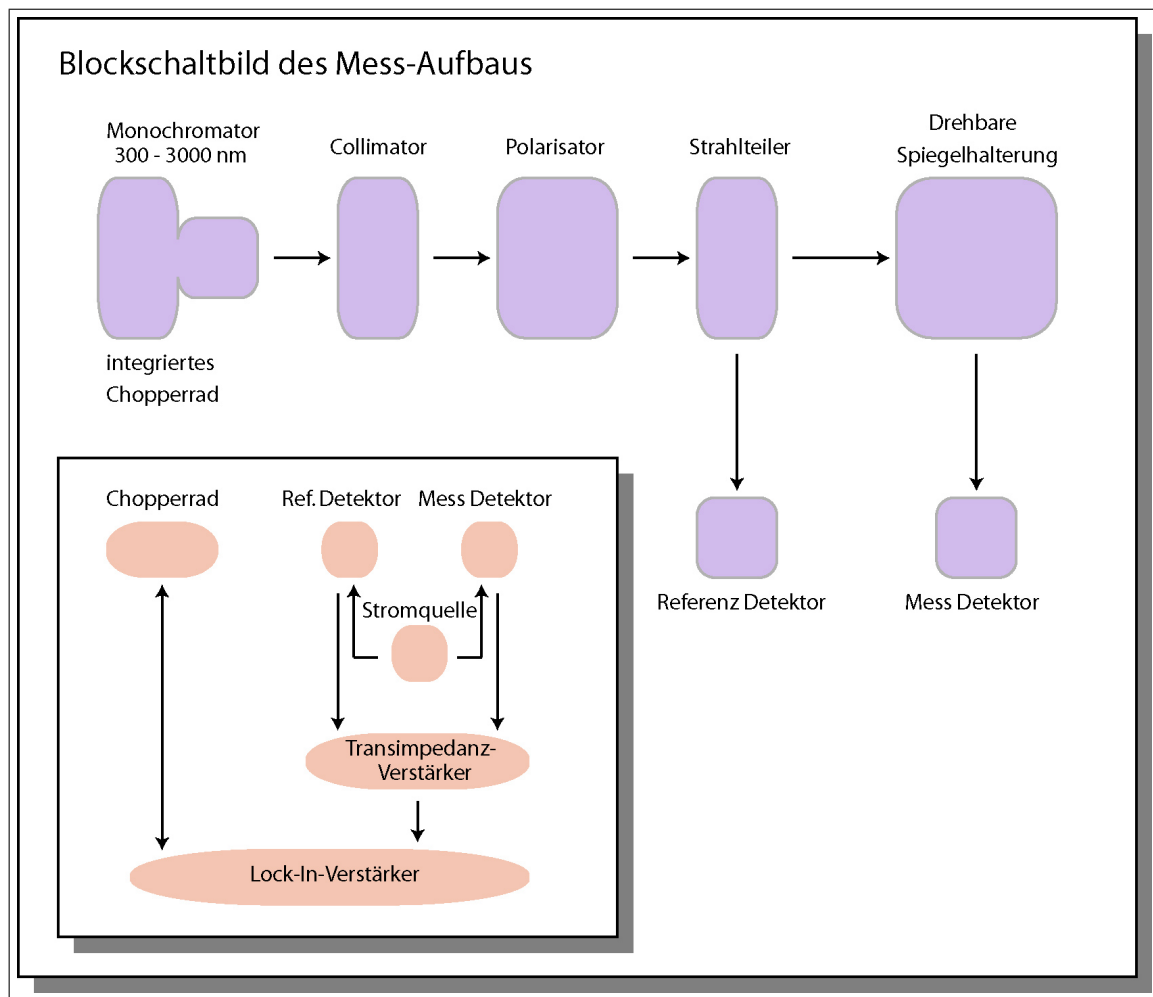


Abbildung 6.1: Prinzipskizze des Messaufbaus zur Bestimmung der wellenlängenabhängigen spektralen Beugungseffizienz von hergestellten Gitterstrukturen

Gitter gebeugte Licht wird anschließend unter einem Winkel von 15° , vergleichbar zum Spektrometeraufbau, von einem weiteren Off-Axis-Parabolspiegel auf die Messdiode, dem Fotodetektor DA, geleitet und so die gebeugte Lichtintensität vermessen.

Die elektrische Auswertung des Messsignals erfolgt über zwei Impedanzverstärker, die sowohl das aus dem Referenz-Fotodetektor wie auch das aus der Messdiode generierte Stromsignal in ein Spannungssignal umwandeln. Die so erhaltenen und durch den Chopper gepulsten Spannungssignale werden in einen Lock-In-Verstärker eingespeist und dort weiterverarbeitet. Seine Filterfrequenz wird dabei direkt von außen durch das Choppersignal getriggert. Somit ist es möglich, Rauschsignale, hervorgerufen durch kontinuierlich eingestrahltes Umgebungslicht im Messaufbau, vom eigentlichen Messsignal zu entkoppeln und damit herauszufiltern. Die so erhaltenen Messwerte werden mittels GPIB zu einem Rechner übertragen und können dort aufgenommen und weiterverarbeitet werden.

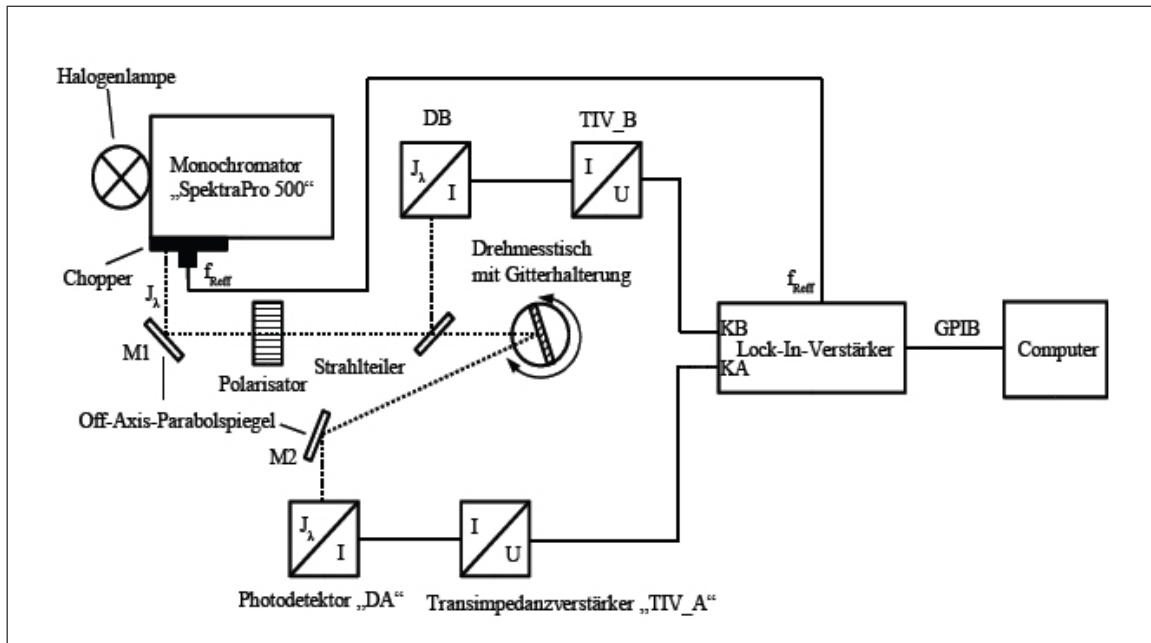


Abbildung 6.2: Optoelektrische Funktionsskizze des Messaufbaus zur Bestimmung der wellenlängenabhängigen spektralen Beugungseffizienz von hergestellten Gitterstrukturen

Zur Messung kann der Monochromator über einen PC auf die gewünschte Wellenlänge eingestellt werden. Gleichzeitig wird das auf dem Drehtisch befindliche mikromechanische Beugungsgitter auf einen Winkel eingestellt, sodass die Beugungsbedingung (vgl. Gl. 3.11) für die zu messende Wellenlänge erfüllt ist. Die Messung wird für beide Polarisationsrichtungen (TE, TM) getrennt durchgeführt. Unter diesen Bedingungen wird zunächst eine unstrukturierte Spiegelplatte als Referenz vermessen, die unter gleichen Herstellungsbedingungen wie die der zu messenden Gitter gefertigt wurde. Damit kann die eingestrahlte Lichtintensität, die zur Berechnung der spektralen Beugungseffizienz benötigt wird, bestimmt werden. Daran anschließend wird das mikromechanische Beugungsgitter eingebaut und die Beugungsintensität in Abhängigkeit der Wellenlänge λ vermessen. Unter Verwendung von Gl. 5.2 kann daraus die spektrale Beugungseffizienz bestimmt werden.

Um eine Qualitätsbewertung der Messung durchführen zu können, müssen einige relevante Punkte des Messaufbaus genauer betrachtet werden. Durch die parallele Messung des Intensitätssignals an der Referenz-Messdiode werden zunächst mögliche Intensitätsschwankungen des Monochromators vollkommen aus der Messung eliminiert. Ebenfalls ohne Einfluss sind dadurch alle Veränderungen der optischen Komponenten, die sich vor dem Strahlteiler befinden. Veränderungen der restlichen passiven optischen Komponenten werden primär durch veränderte Umgebungsbedingungen hervorgerufen (Temperatur, Luftfeuchtigkeit). Da der Messaufbau in einem fensterlosen und klimatisierten Raum realisiert wurde, können diese Einflüsse in guter Näherung vernachlässigt werden. Schwankungen der Sensitivität der Messdioden, sowie Abweichungen durch die Impedanzverstärker wurden durch die Auswahl baugleicher Komponenten ebenfalls auf ein zu vernachlässigendes Minimum reduziert. Damit werden die wichtigsten Einflüsse auf die Messung kontrolliert und gleichzeitig der Einfluss einer auf 3 mm reduzierten Gitterfläche aus

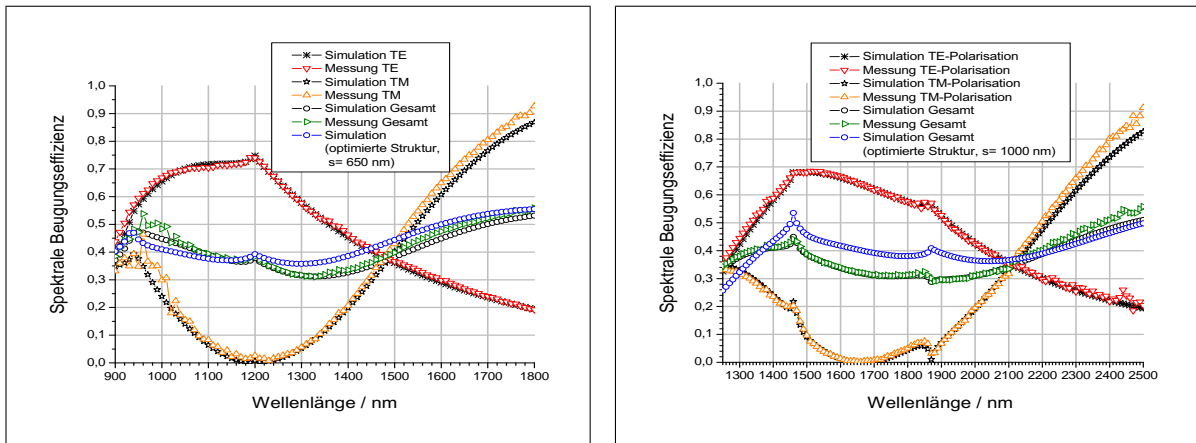


Abbildung 6.3: Vergleich von simulierter und gemessener spektraler Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung trapezförmiger Gitterstrukturen in Abhängigkeit der Wellenlänge; links: Gitterkonstante von 1600 nm, Stegbreite s von 670 nm; rechts: Gitterkonstante von 2500 nm, Stegbreite s von 1184 nm. Simulation und Messung stimmen in hoher Genauigkeit überein.

der Bestimmung der Effizienz ausgenommen. Somit sind die gemessenen Werte mit den Simulationsdaten und Werten aus der Literatur, die grundsätzlich von einem unendlich ausgedehnten Gitter ausgehen, vergleichbar.

In Abb. 6.3 sind gemessene Effizienzen für trapezförmige Gitter mit einer Gitterkonstante von 1600 nm bzw. 2500 nm, die in Wellenlängenintervallen von 10 nm gemessen wurden, den in Kap. 5.2.1 vorgestellten Simulationen gegenübergestellt. Die Stegbreite s der Gitter wurde während des Herstellungsprozesses mit dem Raster-Elektronen-Mikroskop (REM) vermessen. Für eine Gitterkonstante von 1600 nm ergab sich dabei ein Wert von 670 nm. Die Simulation wurde auf diese Stegbreite angepasst. Die Messung der hergestellten Gitter zeigt eine minimale Effizienz von 31,0%, eine maximale Effizienz von 56,0% und eine mittlere Effizienz von 42,1%. Sie korreliert in hohem Maße mit der auf die Stegbreite angepassten Simulation. Im Vergleich zur idealen Struktur aus der Simulation, mit einer Stegbreite s von 650 nm, zeigt das Gitter nur minimale Effizienzunterschiede. Damit trifft das hergestellte Gitter fast exakt die aus Kap. 5.2.1 hergeleitete optimale Gitterform mit der Stegbreite s von 650 nm.

Für das hergestellte Gitter mit einer Gitterkonstante von 2500 nm, ergab sich eine gemessene Stegbreite s von 1184 nm. Die Simulation wurde auch hier mit der gleichen Stegbreite durchgeführt. Die hergestellten Gitter zeigen eine minimale Effizienz von 28,0%, eine maximale Effizienz von 51,5% und eine mittlere Effizienz von 36,7%. Damit weicht das hergestellte Gitter leicht von der aus Kap. 5.2.1 simulierten optimalen Gitterstruktur mit einer Stegbreite s von 1000 nm ab. Dies spiegelt sich in einer reduzierten mittleren Effizienz gegenüber dem simulierten Optimum von 40,5% wider. Wie für das Gitter mit einer Gitterkonstante von 1600 nm nachgewiesen, ist dies aber durch eine Optimierung der TMAH-Ätzung in der Gitterherstellung leicht zu korrigieren.

Allgemein wird deutlich, dass die gemessenen Daten die auf die Stegbreite s angepasste Simulation sehr gut bestätigen. Gleichzeitig zeigt sich, dass die Gitterkonstante von 1600 nm bzw. 2500 nm mit einer hohen Genauigkeit reproduziert werden konnte, da die Messung der Effizi-

enz sehr empfindlich auf Änderungen der Gitterkonstante ist. Deutlich wird dies an den Stellen der Effizienzpeaks bei 1196 nm bzw. 1868 nm. Eine Abweichung der Gitterkonstante würde eine Verschiebung dieser Effizienzpeaks zu anderen Wellenlängen hervorrufen. Unter Verwendung von Gl. 4.25 aus Kap. 4.2 lässt sich berechnen, dass eine Änderung der Gitterkonstante von $\pm 7,6$ nm zu einer Verschiebung des Peaks um ± 10 nm führen würde. Dies ist in der Messung im Vergleich zur Simulation nicht feststellbar. Damit hat die hergestellte Gitterkonstante eine maximale Abweichung von nur $\pm 7,6$ nm zum designten Wert.

Ebenfalls festzustellen ist, dass die aus der Simulation gewünschte Verringerung der Effizienzpeaks mit Anpassung der Stegbreite s durch die gefertigten Gitter bestätigt wird. Sie wurden erfolgreich auf ein Minimum reduziert. Die hergestellten Gitter zeigen also eine hohe Übereinstimmung mit den zur Simulation verwendeten theoretischen Gitterformen. Dies gilt ebenso für die Genauigkeit der Gitterkonstante.

Die hier vorgestellte Technologie ist also in der Lage, trapezförmige Gitterstrukturen mit einer hohen Genauigkeit zu erzeugen. Zukünftige Optimierungen hinsichtlich veränderter Spektrometeranforderungen sind somit allein durch Simulationen möglich, ohne eine zeit- und kostenaufwendige Fertigung der Gitter durchführen zu müssen. Die Messungen zeigen weiterhin, dass die in der Simulation berechneten Effizienzwerte in der Technologie umgesetzt werden können und damit eine optimale Voraussetzung für den Einsatz in einem miniaturisierten NIR-Spektrometer darstellen.

Parallel wurden auch Messungen an hergestellten sinusförmigen Gitterstrukturen durchgeführt. Wie bereits in Kap. 5.2.2 simuliert, ergibt sich eine deutliche Steigerung der Effizienz bei sinusförmigen Gittern, wenn ausschließlich die +1. Beugungsordnung propagiert. Bei Gittern mit einer Gitterkonstante von 2500 nm tritt dieser Fall erst bei höheren Wellenlängen ab 1868 nm auf (vgl. Tab. 5.1), wodurch dieser positive Einfluss gering ausfällt. Aus diesem Grund beschränkte sich die Herstellung von sinusförmigen Gitterstrukturen allein auf eine Gitterkonstante von 1600 nm, da hier dieser Fall bereits ab 1196 nm und damit deutlich früher erreicht werden kann (vgl. Tab. 5.1).

Die technologischen Anforderungen an eine möglichst optimale sinusförmige Gitterform ist, wie bereits in Kap. 5.3.2 beschrieben, von mehreren Faktoren abhängig, die optimiert und überwacht werden müssen. Hierzu gehört die Strukturtiefe, Abweichungen der idealen Sinusform, die trapezförmige Grundstruktur, die Abscheidung und Fließeigenschaft des dotierten Siliziumoxids. Die höchste erreichte Effizienz hergestellter sinusförmiger Gitter ist in Abb. 6.4 dargestellt. Die mittlere Effizienz ergab sich zu 48,8%, bei einer minimalen Effizienz von 22,4% und einer maximalen Effizienz von 63,6%.

Um die gemessenen Effizienzen der Simulation gegenüberstellen zu können, war die Form der hergestellten Gitterstrukturen möglichst genau zu vermessen. Hierzu wurde die Gitterstruktur nach der Messung gebrochen, um die Struktur des Gitters im Raster-Elektronen-Mikroskop (REM) vermessen zu können. Das so erhaltene REM-Bild wurde mithilfe eines Grafikprogramms mit einer Konturlinie versehen (s. Abb. 6.4) und diese als Punktdiagramm ausgegeben. Durch die Konturlinie konnte die Form des Gitters in das Simulationsprogramm übertragen werden und damit eine der Realität angepasste Simulation durchgeführt werden.

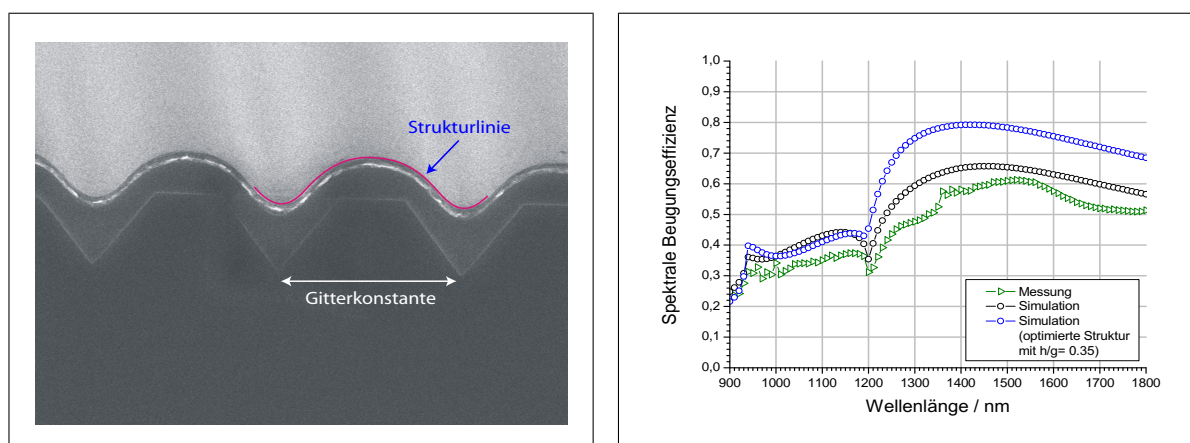


Abbildung 6.4: links: REM-Aufnahme mit angefitteter Konturlinie einer sinusförmigen Gitterstruktur, verwendet zur Bestimmung der Formparameter; rechts: Vergleich von simulierter und gemessener spektraler Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung in Abhängigkeit der Wellenlänge für eine Gitterkonstante von 1600 nm unter Verwendung der gefitteten Formparameter mit einer Gittertiefe h von 540 nm und h/g von 0,34

Die Ergebnisse sind in Abb. 6.4 dargestellt. Es zeigt sich, dass die Simulation durch die Messung bestätigt wird, die Abweichungen im Mittel aber stärker ausfallen, als bei trapezförmigen Gitterstrukturen. Der Grund der Abweichung liegt vermutlich an der nicht ideal übertragbaren realen Gitterstruktur, da durch die Messung und die Nachbearbeitung im Grafikprogramm unvermeidbare Abweichungen auftreten. Der Effizienzpeak wird dagegen gut abgebildet, ist aber wellenlängenabhängig um ca. 10 nm verschoben. Dies kann sowohl in Messfehlern als auch durch eine geringe Abweichung der Gitterkonstante begründet sein. Im Vergleich zur optimalen simulierten Gitterstruktur ist die gemessene mittlere Effizienz um 12,9% geringer. Die geringen Abweichungen der realen sinusförmigen Gitterstruktur zeigen demnach einen relevanten Einfluss auf die Reduktion der optimalen Beugungseffizienz. Gleichzeitig ergibt sich auch ein erhöhter Effizienzpeak bei einer Wellenlänge von 1210 nm.

Zur Vollständigkeit der Ergebnisse wurde auch die spektrale Beugungseffizienz geblazter Gitterstrukturen vermessen, obwohl der durch die Substrate festgelegte Blazewinkel von 9° zu erhöhten Gitterkonstanten führt (vgl. Kap. 5.3.3). In Abb. 6.5 sind die Messwerte im Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm und einer Gitterkonstante von 3650 nm den simulierten Werten gegenübergestellt. Die Stegbreite wurde dabei durch eine REM-Messung mit einem Wert von 360 nm bestimmt und eine angepasste Simulation durchgeführt. Es zeigt sich, dass die Simulation bis zu einer Wellenlänge von 1180 nm sehr gut mit den gemessenen Werten übereinstimmt, für größere Wellenlängen ist die gemessene Beugungseffizienz ca. 10% niedriger. Die mittlere Effizienz ergibt sich zu 66,6%, bei einer minimalen Effizienz von 45,7% und einer maximalen Effizienz von 78,4%. Die gemessenen Werte liegen damit nur minimal unter der idealen simulierten mittleren Beugungseffizienz von 74,5%, für den Fall, dass die Stegbreite auf null gesetzt wird.

Für den Wellenlängenbereich von 1250 nm - 2500 nm und einer Gitterkonstante von 5650 nm sind gemessene und simulierte Werte der spektralen Beugungseffizienz in Abb. 6.5 dargestellt.

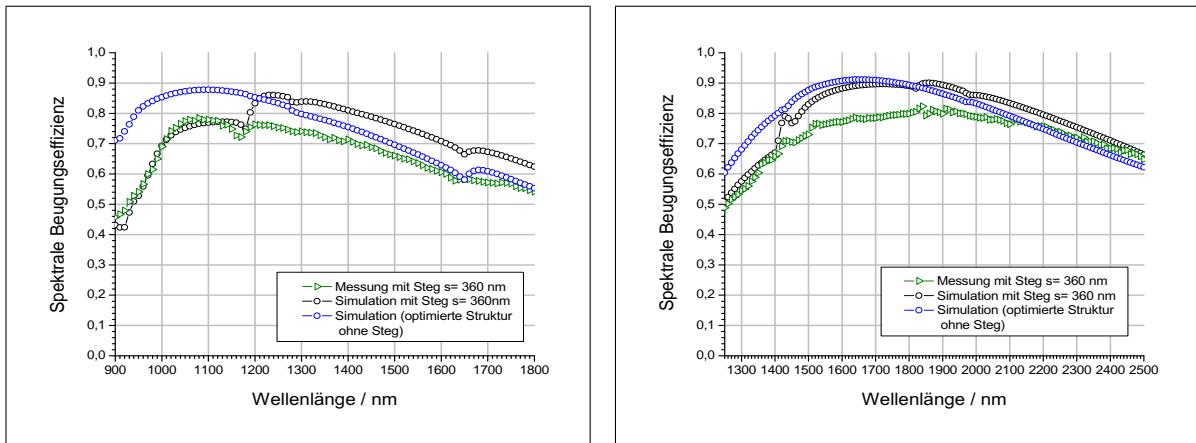


Abbildung 6.5: Vergleich von simulierter und gemessener spektraler Beugungseffizienz der +1. Beugungsordnung geblazter Gitterstrukturen in Abhängigkeit der Wellenlänge und einem Blazewinkel von 9° ; links: Gitterkonstante von 3650 nm für einen Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm; rechts: Gitterkonstante von 5650 nm für einen Wellenlängenbereich von 1250 nm - 2500 nm

Auch hier wurde die Stegbreite durch eine REM-Messung mit 360 nm bestimmt und eine auf diese Stegbreite angepasste Simulation durchgeführt. Die Messung bestätigt grundsätzlich die Simulation, die Abweichung liegt im Mittel bei nur 6,2%. Die hergestellte geblazte Gitterstruktur erreicht eine mittlere Effizienz von 73,2%, eine minimale Effizienz von 48,9% und eine maximale Effizienz von 82,3%. Die gemessenen Werte liegen damit sehr nahe an der idealen simulierten mittleren Beugungseffizienz von 79,6%, für den Fall, dass die Stegbreite den Wert null annimmt.

Vergleichbar zu hergestellten, trapezförmigen und sinusförmigen Gitterstrukturen konnte auch für geblazte Gitter grundsätzlich nachgewiesen werden, dass hohe Beugungseffizienzen erreicht werden können, die nur minimal von den simulierten Werten abweichen. Unter Verwendung von Sondersubstraten mit Blazewinkeln von 22° bzw. 25° (vgl. Kap. 5.3.3) ist somit gesichert, dass auch hocheffiziente, geblazte Beugungsgitter für den Einsatz im miniaturisierten NIR-Spektrometer gefertigt werden können.

6.1.2 Planarität der Gitterspiegelplatte

Die bewegliche Gitterspiegelplatte der mikromechanischen Beugungsgitter wird, wie bereits beschrieben, für eine optimierte Reflektivität mit einer Aluminiumschicht bedampft. Im Fall des sinusförmigen Gitters wird zusätzlich eine bor- und phosphordotierte Siliziumoxidschicht abgeschieden, die zur Verrundung der Gitterstruktur verwendet wird. Zudem wird eine Siliziumnitrid-Abscheidung vorgenommen, um die verrundete Struktur im folgenden Herstellungsprozess zu schützen (vgl. Kap. 5.3.2). Die genannten Schichten, die sich auf der frei beweglichen Gitterspiegelplatte befinden, können zu einer Krümmung der Platte führen, wenn eine resultierende mechanische Spannung aller Einzelschichten verbleibt [85]. In diesem Fall krümmt sich die Gitterspiegelplatte derart, dass sich ein Kräftegleichgewicht zwischen der bestehenden Schichtspannung und der durch die Krümmung generierten Rückstellkraft im Material einstellt.

Um die Krümmung der mikromechanischen Beugungsgitter zu bestimmen, wurden die gefertigten Bauelemente mittels Weißlichtinterferometrie [86] vermessen. Als Referenz wurde außerdem ein mikromechanischer Spiegel untersucht, der ohne Gitterstrukturierung mit gleicher Verspiegelung gefertigt wurde. Dieser Referenzspiegel zeigt aufgrund der aufgetragenen Aluminium-Reflexionsschicht eine sphärische Krümmung von $0,65\text{ m}^{-1}$. Die ermittelten Messwerte sind in Abb. 6.6 dargestellt. Die sphärische Krümmung bildet sich aus, da die Spiegelplatte durch die Torsionsfedern nur an zwei Ankerpunkten im Chiprahmen eingespannt ist und sich die Schichtspannung des Aluminiums isotrop über die Fläche der Spiegelplatte verteilen kann.

Im Vergleich hierzu wurden zunächst trapezförmige Beugungsgitter vermessen. Wie in Abb. 6.7 dargestellt, ist die resultierende Krümmung der Gitterspiegelplatte anisotrop und bildet

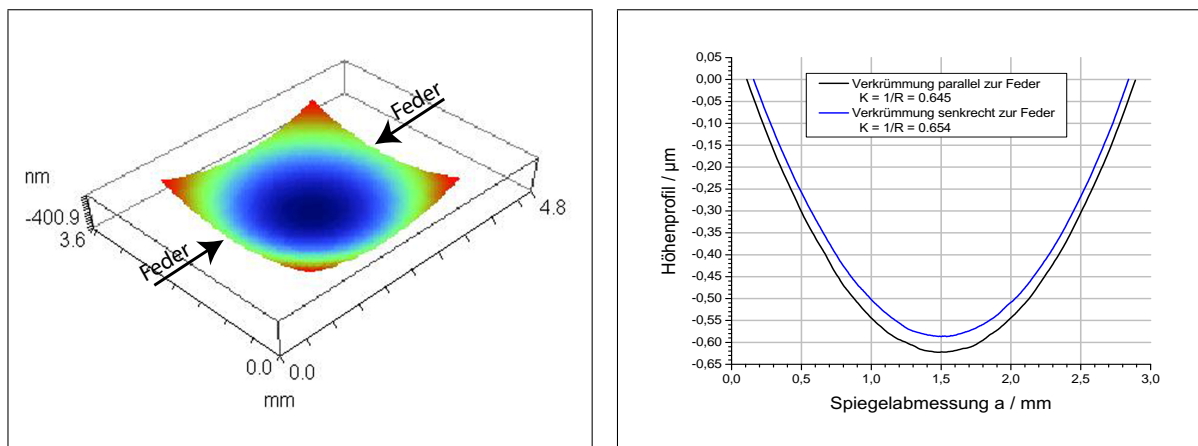


Abbildung 6.6: Krümmungsmessung eines mikromechanischen Referenzspiegels ohne Gitterstrukturierung mittels Weißlichtinterferometrie. Es ergibt sich eine sphärische Krümmung, die durch die Schichtspannung der Verspiegelungsschicht ($\text{SiO}_2 - \text{Al} - \text{SiO}_2$) hervorgerufen wird

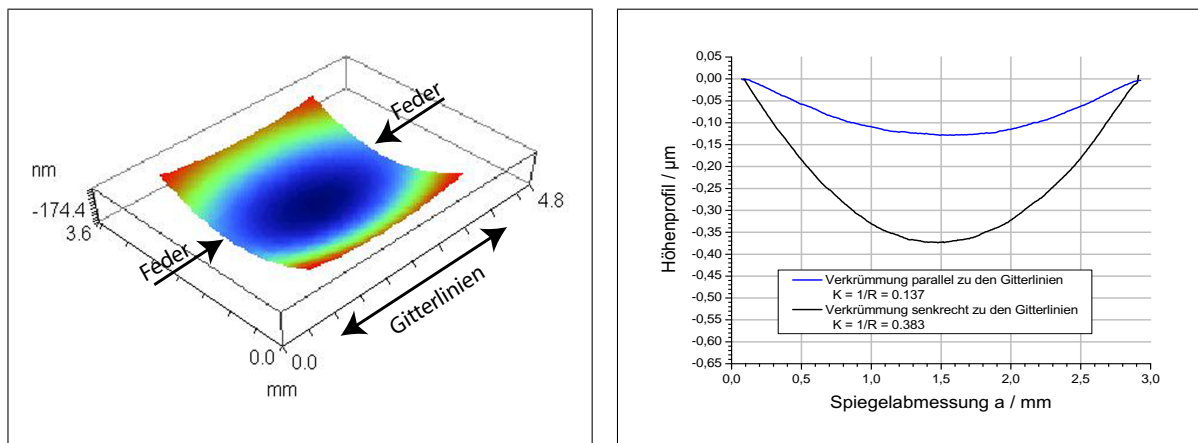


Abbildung 6.7: Krümmungsmessung der Gitterspiegelplatte mit trapezförmiger Gitterstruktur mittels Weißlichtinterferometrie. Es bildet sich eine elliptische Krümmung aus, die durch die Schichtspannung der Verspiegelungsschicht ($\text{SiO}_2 - \text{Al} - \text{SiO}_2$) hervorgerufen wird und quer zu den Gitterstrukturen stärker ausgeprägt ist.

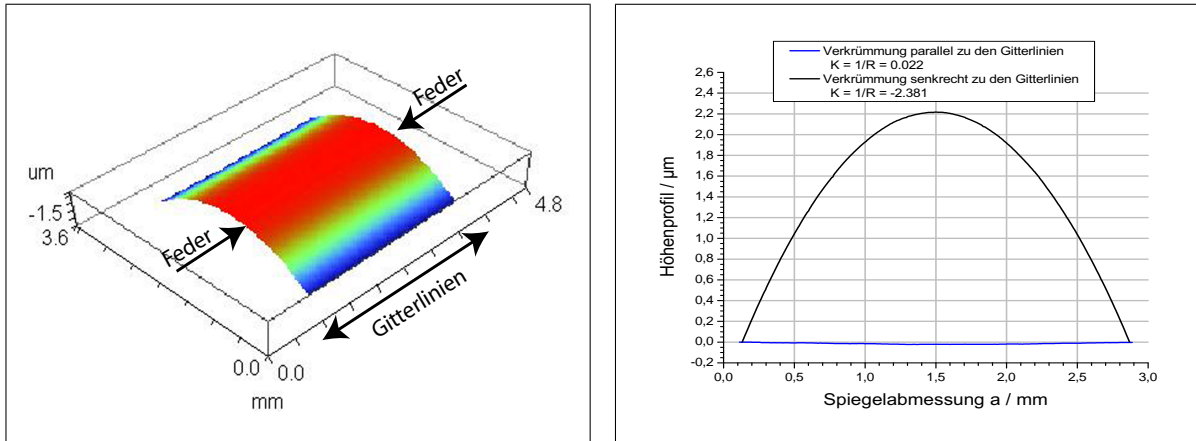


Abbildung 6.8: Krümmungsmessung der Gitterspiegelplatte mit sinusförmiger Gitterstruktur mittels Weißlichtinterferometrie. Es bildet sich vergleichbar zu trapezförmigen Gitterstrukturen eine elliptische Krümmung aus, die durch die Schichtspannung des BPSG, der Nitrid- und der Verspiegelungsschicht ($\text{SiO}_2 - \text{Al} - \text{SiO}_2$) hervorgerufen wird und die quer zu den Gitterstrukturen stärker ausgeprägt ist.

sich parallel und senkrecht zu den gefertigten Gitterstrukturen unterschiedlich aus. Senkrecht zu den Gitterstrukturen ergeben sich vergleichbare Krümmungswerte zum Referenzspiegel von 0.38 m^{-1} . Parallel zu den Strukturen ist die Krümmung dagegen reduziert und ergibt Werte von nur 0.14 m^{-1} . Ursache hierfür ist die trapezförmige Gitterstruktur. Die resultierende Kraft der Schichtspannung der Aluminiumschicht wird dabei durch die topologische Struktur des Gitters in der Gitterspiegelplatte richtungsabhängig beeinflusst.

Ein vergleichbares Ergebnis zeigt sich bei sinusförmigen Gitterstrukturen. Auch hier ist die Krümmung der Gitterspiegelplatte richtungsabhängig und damit anisotrop. Zusätzlich ist die Gitterspiegelplatte nach unten gekrümmt (s. Abb. 6.8). Ursache hierfür ist die druckverspannte Oxidschicht (BPSG), die zur Verrundung der Gitter verwendet wird. Senkrecht zu den Gitterstrukturen ergeben sich hier Krümmungswerte von $-2,38 \text{ m}^{-1}$, parallel dazu Werte von $0,02 \text{ m}^{-1}$.

Geblazte Gitterstrukturen wurden in diesem Fall nicht untersucht, da nur Siliziumsubstrate mit einem Blazewinkel von 9° zur Verfügung standen, und somit eine deutliche Abweichung in der Gitterkonstante erforderten (vgl. Kap. 5.3.3). Da die Herstellung zu trapezförmigen Gitterstrukturen allerdings sehr ähnlich ist, kann davon ausgegangen werden, dass sich die Krümmung von mikromechanischen Beugungsgittern mit geblazten Gitterstrukturen äquivalent verhält.

Die hier ermittelten Werte der Krümmung der Gitterspiegelplatte variieren stark mit der hergestellten Gitterstruktur. Für den Einsatz in einem miniaturisierten NIR-Spektrometer bedeutet dies einen signifikanten Einfluss auf die dort integrierte Optik. Variationen in der Krümmung der Gitterspiegelplatte können zu einer Defokussierung des Lichtstrahls an der Detektordiode führen, die die Auflösung des Spektrometers von 10 nm empfindlich beeinflussen und damit stören kann. Um diesen Einfluss zu minimieren, ist die Schichtspannung der auf dem Gitter aufgetragenen Schichten zu optimieren. Dies kann durch weitergehende Entwicklungen der Schichtabscheidungs-

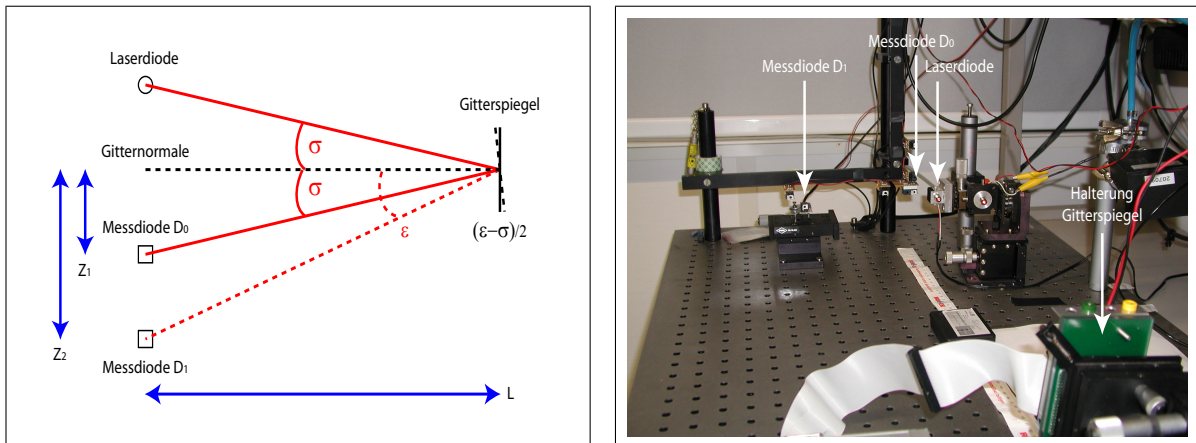


Abbildung 6.9: Messaufbau zur Bestimmung der Schwingungsamplitude Ω_0 und der Schwingungsfrequenz f_{mB} ; links: Prinzipskizze mit Parametern; rechts: Bild des Messaufbaus

prozesse erreicht werden. Parallel hierzu ist auch eine Anpassung des optischen Aufbaus des miniaturisierten NIR-Spektrometers denkbar. Für die hier gezeigte anisotrope Krümmung der Gitterspiegelplatte ist eine optische Kompensierung allerdings nicht einfach, da die Krümmungswerte über die unterschiedlichen Gitterarten signifikant schwanken.

6.2 Mechanische Analyse der mikromechanischen Beugungsgitter

6.2.1 Antriebsspannung, Schwingungsamplitude, Frequenz

Die hergestellten mikromechanischen Beugungsgitter wurden bezüglich der mechanischen Grundeigenschaften untersucht. Um die Schwingungsamplitude und die Frequenz bestimmen zu können, wurde ein Messplatz wie in Abb. 6.9 dargestellt, aufgebaut. Die Messung erfolgt über eine rote Laserdiode bei einer Wellenlänge von 633 nm , die oberhalb einer Messleiste mit zwei Fotodioden angebracht ist. Da das Gitter offensichtlich auch den Messstrahl beugt, treten propagierende Beugungsordnungen auf, die durch die geringere Wellenlänge des Lichts verglichen zum NIR-Bereich, deutlich enger aneinander liegen. Dies führt dazu, dass sowohl die Frequenz- wie auch die Amplitudenmessung nur für begrenzte Winkel bestimmt werden kann, damit nur die Direktreflexion (0. Beugungsordnung) detektiert wird. Wird die Schwingungsamplitude der Gitterspiegelplatte zu groß, entstehen Signale der Beugungsordnungen, die die Messung verfälschen.

Aus diesem Grund wurden die Messungen durch ein Loch im Gehäuse auf der unstrukturierten Rückseite der Gitterspiegelplatte durchgeführt. Die Siliziumoberfläche ist dabei für die Reflexion des Laserlichts ausreichend. Somit ist die Messung unabhängig von störenden Gittereigenschaften. Zu Beginn der Messung wird das mikromechanische Beugungsgitter so justiert, dass der reflektierte Laserstrahl unter einem Winkel σ und einem normierten Abstand l auf die Null-Durchgangs-Diode D_0 trifft. Die zweite Messdiode D_1 ist unter einem Winkel ϵ zur Gitternormale angebracht. Beide Dioden liegen auf einer Ebene z . Somit lässt sich die Schwingungsfrequenz f_{mB} des mikromechanischen Beugungsgitters durch zwei hintereinander aufgenommene Signale

der Null-Durchgangs-Diode D_0 messen mit

$$f_{mB} = \frac{2}{T_{n+1}(D_0) - T_n(D_0)} \quad (6.1)$$

Die Schwingungsamplitude Ω_0 lässt sich durch trigonometrische Betrachtungen (s. Abb. 6.9) des Messaufbaus (vgl. Anhang Kap. 9.5) bestimmen mit

$$\Omega_0 = \frac{\frac{1}{2} (\arctan(\frac{z_2}{l}) - \arctan(\frac{z_1}{l}))}{\sin[2\pi f_{mB} \cdot (t(D_1) - t(D_0))]} \quad (6.2)$$

Mit diesem Versuchsaufbau kann somit die Schwingungsfrequenz und die Schwingungsamplitude sowohl bei festen Antriebsfrequenzen wie auch im synchronisierten Antrieb gemessen werden (s. Kap. 4.1). In Abb. 6.10 ist die Frequenz-Amplituden-Kennlinie eines mikromechanischen Beugungsgitters mit balkenförmiger Torsionsfeder bei einer Antriebsspannung U von 30 V gezeigt. Die Schwingungsfrequenz f_{mA} bei maximaler Schwingungsamplitude $\Omega_{0,max}$ liegt bei 154 Hz und damit nahe an der im Entwurf berechneten Eigenfrequenz von 150 Hz.

Parallel wurden auch die Spannungs-Amplituden- und die Spannungs-Frequenz-Kennlinie von ausgewählten mikromechanischen Beugungsgittern vermessen (s. Abb. 6.11). Hierzu wurde der synchronisierte Antrieb verwendet und damit für jede Antriebsspannung die maximale Schwingungsamplitude bestimmt. Die Spannungs-Amplituden-Kennlinie zeigt einen linearen Verlauf, wobei Amplituden von ca. $\pm 8^\circ$ bei 26 V erreicht werden. Interpoliert man die Kennlinie, wird eine maximale Schwingungsamplitude von $\pm 9^\circ$ bei ca. 29 V erreicht. Damit kann der für die spektrale Messung benötigte Winkelbereich Ω_{sp} , bei ebenfalls $\pm 9^\circ$, mit der im miniaturisierten NIR-Spektrometer verfügbaren Spannung von 36 V sicher eingehalten werden.

Die Spannungs-Frequenz-Kennlinie zeigt eine leichte Abweichung der Schwingungsfrequenz f_{mA} in Abhängigkeit der Antriebsspannung U von 0, 15 Hz/V. Diese könnten in der hier vernachlässig-

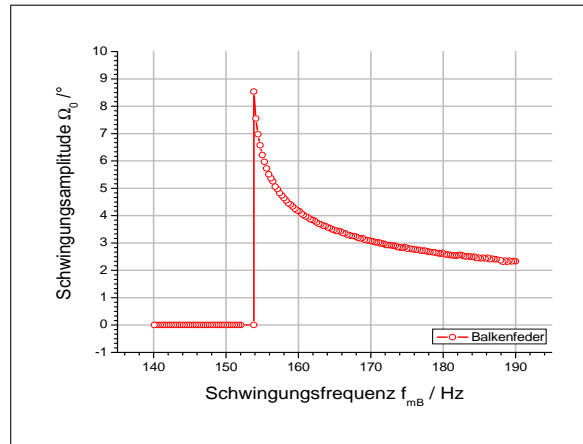


Abbildung 6.10: Messung der Frequenz-Amplituden-Kennlinie eines mikromechanischen Beugungsgitters bei einer Antriebsspannung U von 30 V. Die Schwingungsfrequenz f_{mA} , bei der die Schwingung einbricht, liegt bei 154 Hz und damit nahe an der entworfenen Eigenfrequenz von 150 Hz. Damit bestätigen sich die Berechnungen des erstellten Designs aus Kap. 4.1.

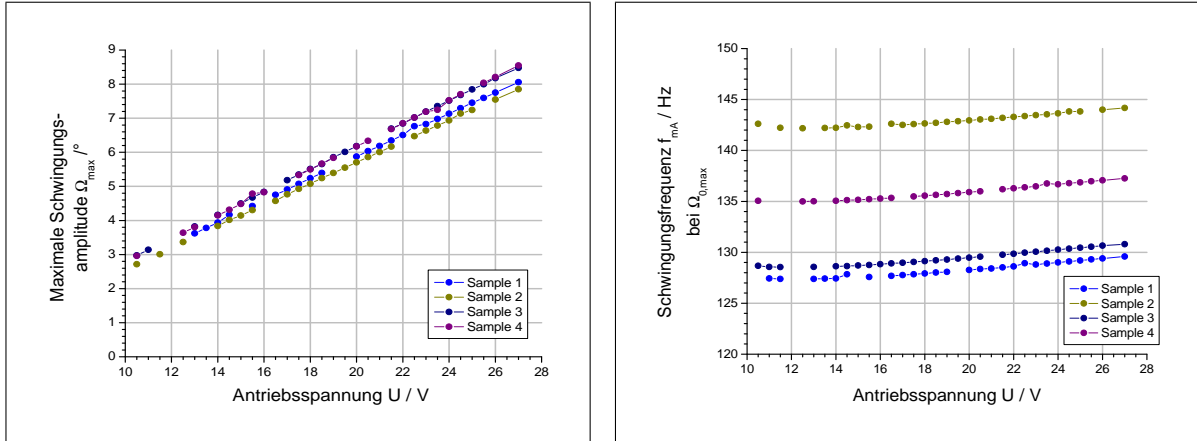


Abbildung 6.11: links: Messung der Spannungs-Amplituden-Kennlinie von mikromechanischen Beugungsgittern im synchronisierten Betrieb. Es zeigt sich eine lineare Abhängigkeit mit einer maximalen Schwingungsamplitude von $\pm 8^\circ$ bei 26 V; rechts: Messung der Spannungs-Frequenz-Kennlinie von ausgewählten mikromechanischen Beugungsgittern im synchronisierten Betrieb. Es zeigt sich eine geringe Abweichung der Schwingungsfrequenz $f_{m,A}$ bei $\Omega_{0,\max}$ zur Antriebsspannung U von ca. 0,15 V/Hz.

ten Dämpfung des Umgebungsgases begründet sein, die Einfluss auf die Schwingung der Gitterspiegelplatte hat. Auf die Funktion des NIR-Spektrometers hat dieser Effekt keinen signifikanten Einfluss, da das mikromechanische Beugungsgitter bei fester Antriebsspannung U betrieben wird. Die Schwingungsamplitude wird wie bereits in Kap. 4.4 beschrieben allein über die Anregungsfrequenz f_{anr} geregelt.

Zusammenfassend wird deutlich, dass die mechanischen Eigenschaften des mikromechanischen Beugungsgitters die designten Werte bestätigen und gleichzeitig die benötigten Anforderungen für das miniaturisierte NIR-Spektrometer erfüllen.

6.2.2 Analyse der mikromechanischen Schwingung

Die Auswertung des gemessenen Spektrums ist, wie bereits in Kap. 4.4 hergeleitet, entscheidend vom zeitabhängigen Torsionswinkel $\Omega(t)$ der Gitterspiegelplatte abhängig. Zur Herleitung wurde dabei der Idealfall angenommen, dass die Gitterspiegelplatte sinusförmig schwingt (s. Gl. 4.51). Um dies zu bestätigen, wurde der Torsionswinkel in Abhängigkeit der Zeit $\Omega_M(t)$ für ein gefertigtes mikromechanisches Beugungsgitter gemessen und untersucht.

Der bereits beschriebene Versuchsaufbau aus Abb. 6.9 wurde hierfür diese Untersuchung geringfügig modifiziert, indem die Messdiode D_1 auf einen Kreutztisch montiert wurde und somit eine Verschiebung entlang der z-Achse ermöglicht. Beginnend von der Ruhelage $\Omega = 0$ der Gitterspiegelplatte (bei $z_2 = z_1$) wurde der Abstand z_2 sukzessiv erhöht. Dabei definiert der Abstand z_2 der Messdiode D_1 eindeutig den Torsionswinkel Ω_M der Gitterspiegelplatte, bei der die Messdiode D_1 vom Laserstrahl getroffen wird. Der Torsionswinkel Ω_M kann durch trigonometrische

Betrachtungen bestimmt werden zu

$$\Omega_M = \frac{\epsilon - \sigma}{2} = \frac{\tan\left(\frac{z_2}{l}\right) - \tan\left(\frac{z_1}{l}\right)}{2} \quad (6.3)$$

und ist somit nur von den gewählten Abständen im Messaufbau abhängig. Für jeden eingestellten Abstand z_2 der Messdiode D_1 wurde das Zeitsignal t zwischen Messdiode D_1 und D_0 detektiert. Der aus dem eingestellten Abstand z_2 berechnete Torsionswinkel Ω_M wurde in Abhängigkeit der gemessenen Zeit t aufgetragen und somit sukzessive der reale Schwingungsverlauf des mikromechanischen Beugungsgitters aufgenommen. Dabei wurden kleinere Abstände von z_2 nahe der Ruhelage der Gitterspiegelplatte gewählt, da hier die Schwingung die größte Geschwindigkeit

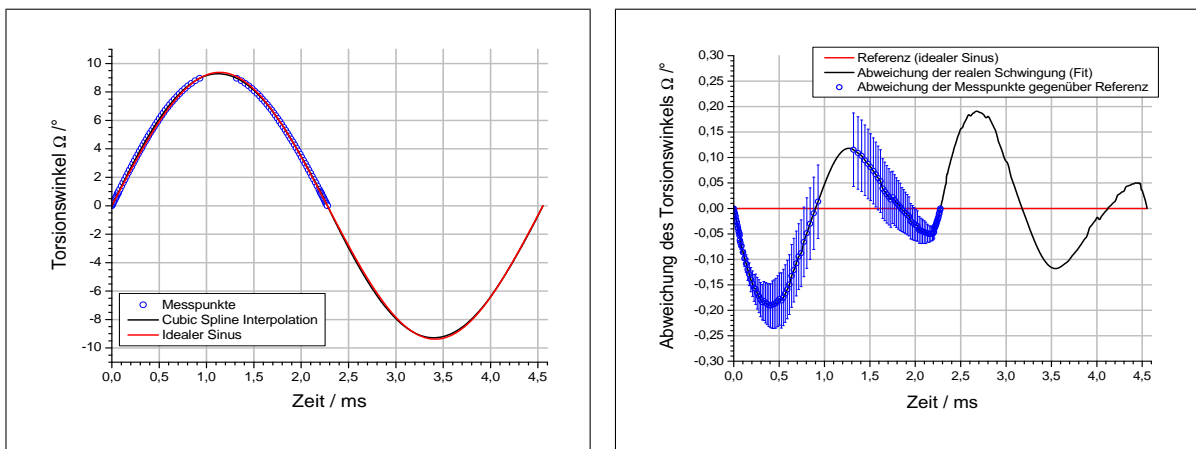


Abbildung 6.12: links: Cubic Spline Interpolation einer gemessenen Schwingung eines mikromechanischen Beugungsgitters im Vergleich zu einem idealen Sinusverlauf; rechts: Abweichung der Schwingungsamplitude in Abhängigkeit der Zeit zwischen idealem Sinusverlauf und realer Messung der Schwingung eines mikromechanischen Beugungsgitters

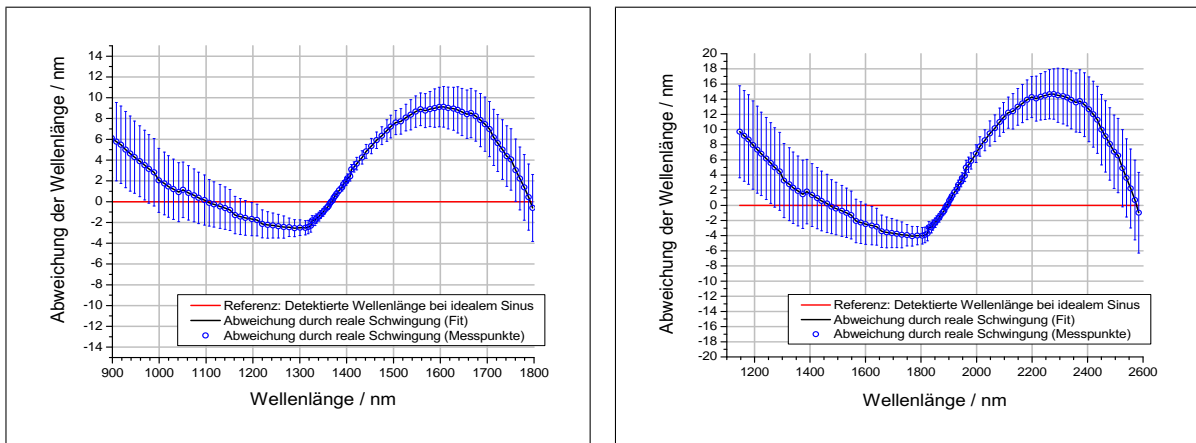


Abbildung 6.13: Abweichung der gemessenen zur realen Wellenlänge, hervorgerufen durch die Abweichung der Schwingung eines mikromechanischen Beugungsgitters von einem idealen Sinusverlauf; links: für einen Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm; rechts: für 1250 nm - 2500 nm

besitzt.

Um die gemessenen Daten mit der angenommenen idealen Sinusschwingung vergleichen zu können, wurden die Messdaten unter Verwendung einer Cubic Spline Interpolation [87] gefittet. Vorteil dieser Methode ist, dass nur der Kurvenverlauf zwischen zwei benachbarten Messpunkten gefittet wird, die Messpunkte aber weiterhin auf der gefitteten Kurve liegen. Somit ist eine höchstmögliche Genauigkeit des verwendeten Fits zu den gemessenen Daten sichergestellt. In Abb. 6.12 *links* sind die Messdaten, der Fit sowie ein idealer Sinus mit angepasster Frequenz und Schwingungsamplitude dargestellt. Es wird deutlich, dass die Schwingung der Gitterspiegelplatte zwar annähernd sinusförmig verläuft, Abweichungen zur Sinuskurve allerdings vorhanden sind. Die Höhe dieser Abweichung in Abhängigkeit der Zeit t ist in Abb. 6.12 *rechts* dargestellt. Die größte gemessene Differenz ergibt sich zu $0,191^\circ$. Ursächlich sind dämpfende Momente, die durch Reibung vor allem durch das umgebende Fluid hervorgerufen werden und Abhängigkeiten des elektrostatischen bzw. mechanischen Drehmoments in Abhängigkeit des Torsionswinkels Ω .

Es ist festzustellen, dass die gemessenen Abweichungen in einem geringen Bereich liegen, so dass eine Fehlerabschätzung der Messung erforderlich wird. Wie aus Gl. 6.3 abzuleiten, ist der einzig variable Parameter der eingestellte Abstand z_2 . Die Messungenauigkeit wurde aus der Toleranz des Kreutztisches berechnet. Da der Kreutztisch mehrmals versetzt aufgebaut werden musste, um den gewünschten Messbereich zu erreichen, erhöht sich die Messtoleranz mit zunehmendem Abstand z_2 . Die Messpunkte wurden daher um Fehlerbalken zur Darstellung des Einflusses der Messgenauigkeit ergänzt.

Um den Einfluss der Abweichung der Schwingung auf das ermittelte Spektrum bewerten zu können, wird die ideale Sinusschwingung als Referenz gesetzt ($\Delta\lambda = 0$). Die tatsächlich erfasste Wellenlänge, die durch den gemessenen zeitabhängigen Torsionswinkel $\Omega_M(t)$ bestimmt ist, kann durch die Beugungsbedingung der Czerny-Turner-Konfiguration aus Gl. 3.11 berechnet werden. Der hierfür benötigte Einfallswinkel α kann bestimmt werden durch

$$\alpha = \Omega_M + \alpha_0 \quad (6.4)$$

Die Differenz der Wellenlänge zur idealen Sinusschwingung ($\Delta\lambda = 0$) ist in Abb. 6.13 dargestellt. Es wird deutlich, dass sich die maximale Abweichung der Wellenlänge bis zu 15 nm erstreckt. Bei zusätzlicher Berücksichtigung der Toleranzen des Messplatzes können im schlechtesten Fall Abweichungen der Wellenlänge bis 18 nm entstehen. Für eine aus den Zielspezifikationen des miniaturisierten NIR-Spektrometers geforderte wellenlängenabhängige Auflösung von 10 nm ist dies offensichtlich kritisch. Es ist daher nicht ausreichend für die Berechnung des Spektrums einen idealen Sinusverlauf im Spektrometer zu hinterlegen. Vielmehr muss für eine Messung in den geforderten Spezifikationen die reale Schwingung berücksichtigt werden.

6.2.3 Stabilitätsspannung

Der Antrieb der mikromechanischen Beugungsgitter erfolgt kapazitiv über die Kammelektroden des Chiprahmens und der Gitterspiegelplatte (vgl. Kap. 4.1). Die elektrostatische Kraft, die sich durch die Spannungsdifferenz zwischen den Kammelektroden aufbaut, beschleunigt die

Gitterspiegelplatte aus dem ausgelenkten Zustand in ihre Ruhelage und ermöglicht somit den resonanten Antrieb. Aufgrund der angelegten Spannungsdifferenz an den Kammelektroden ergibt sich gleichzeitig eine laterale Kraft, die parallel zur Gitterspiegelplatte wirkt, und bestrebt ist, den Abstand der sich gegenüberstehenden Kammelektroden auf ein Minimum zu reduzieren. Die Torsionsfedern müssen dieser lateralen Kraft widerstehen, da die Gitterspiegelplatte andernfalls eine torkelnde Schwingungsbewegung ausführen würde.

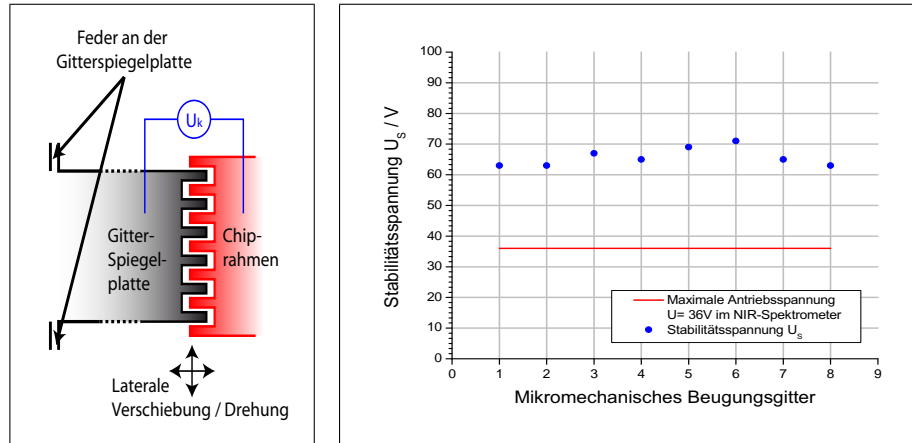


Abbildung 6.14: links: Prinzipskizze der lateralen Verschiebung bzw. Drehung der Gitterspiegelplatte durch Anlegen einer Gleichspannung U_k an die Kammelektroden; rechts: Messung der maximalen Stabilitätsspannung U_S der mikromechanischen Beugungsgitter. Die gemessene Stabilitätsspannung liegt deutlich oberhalb der maximal im miniaturisierten NIR-Spektrometer verwendeten Antriebsspannung U von 36 V.

Um die Widerstandskraft der Torsionsfedern zu messen, wurde zwischen Gitterspiegelplatte und Chiprahmen eine Konstantspannung U_k angelegt und schrittweise erhöht (s. Abb. 6.14). Durch die Konstantspannung wird die Gitterspiegelplatte in ihrer Ruhelage fixiert, es wirken ausschließlich translatorische und rotatorische Kräfte in Chipebene zwischen den Kammelektroden. Durch Steigerung der Spannung U_k , erhöhen sich diese Kräfte, bis sich die Torsionsfedern so weit verformen, dass sich die gegenüberliegenden Kammelektroden berühren. Die hierfür benötigte Spannung U_S ist als Stabilitätsspannung des mikromechanischen Beugungsgitters definiert (vgl. Kap. 4.1). Um das mikromechanische Beugungsgitter zu schützen, wird die verwendete Stromstärke begrenzt, um eine Zerstörung bei Kontakt der Kammelektroden zu vermeiden.

Zur Messung wurden acht mikromechanische Beugungsgitter aus unterschiedlichen Wafern vermessen. Die Ergebnisse sind in Abb. 6.14 dargestellt. Alle Beugungsgitter überschreiten die für das miniaturisierte NIR-Spektrometer spezifizierte maximale Antriebsspannung von 36 V. Die gemessenen Werte der Stabilitätsspannung liegen zwischen 63 V und 71 V. Damit sind sie höher als die in Tab. 4.1 berechneten Werte von 49 V. Die Ursache könnte in einer Verbreiterung des Elektrodenabstands s_k begründet sein (vgl. Gl. 4.14, 4.15), die durch Herstellungstoleranzen verursacht sein kann. Der Einfluss der lateralen Kräfte auf die Schwingungsstabilität der mikromechanischen Beugungsgitter ist allerdings im Hinblick auf die im NIR-Spektrometer verwendete maximale Antriebsspannung von 36 V vernachlässigbar.

6.2.4 Mechanische Schockbelastung

Um die gefertigten mikromechanischen Beugungsgitter auf ihre Schockfestigkeit zu untersuchen, wurden definierte Falltests durchgeführt. Der Messaufbau ist in Abb. 6.15 *links* dargestellt. Er besteht aus einer Fallstange, einem angebrachten Fallblock und einem Bremsblock, auf dem der Fallblock definiert abgebremst wird. Im Fallblock wurde ein Beschleunigungssensor integriert, um die auftretenden Beschleunigungen während der Messung aufzuzeichnen.

Die gefertigten mikromechanischen Beugungsgitter wurden auf Metallplatten geklebt, wobei die Metallplatten auf der Oberseite und an zwei Seitenwänden des Fallblocks montiert wurden. Damit wurde sichergestellt, dass alle mikromechanischen Beugungsgitter einer Metallplatte in x-Richtung (parallel zu den Torsionsfedern), y-Richtung (senkrecht zu den Torsionsfedern) und in z-Richtung (senkrecht zur Gitterspiegelplatte) geprüft werden können. Der Falltest wurde unter Berücksichtigung der ISO-Norm so eingestellt, dass die mikromechanischen Beugungsgitter mit einer Beschleunigung von $\pm 2000g$ (zweitausend-fache Erdbeschleunigung) beaufschlagt wurden, die innerhalb 1 ms auftrat (s. Abb. 6.15 *rechts*). Die Messung wurde zehn mal wiederholt, wobei die mikromechanischen Beugungsgitter nach dem ersten, dritten und letzten Falltest auf Schädigungen unter dem Mikroskop und auf mechanische Funktionsfähigkeit getestet wurden.

Für jede Richtung (x,y,z) wurden zehn Bauteile vermessen. Mikromechanische Beugungsgitter mit Balkenfedern überstanden die Schocktests ohne Schädigung, unabhängig von der Richtung der Schockbeaufschlagung. Um die maximale Belastbarkeit der mikromechanischen Beugungsgitter zu untersuchen, wurde die Beschleunigung von $\pm 2000g$ in Schritten von $500g$ auf $\pm 5000g$, dem Maximum des Messplatzes erhöht. Jeweils zwei Beugungsgitter wurden für alle Richtungen getestet. Schädigungen konnten nicht festgestellt werden, die gemessene maximale Beschleunigung lag in x- und y-Richtung bei $5100g$, in z-Richtung bei $5400g$.

Die Messungen weisen nach, dass die hergestellten mikromechanischen Beugungsgitter die ISO-

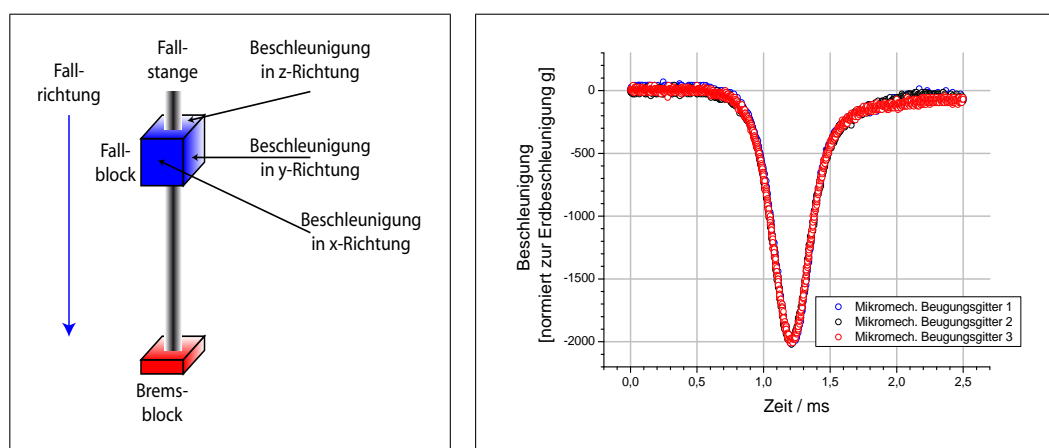


Abbildung 6.15: *links: Prinzipskizze des Messaufbaus zur Bestimmung der Schockfestigkeit mikromechanischer Beugungsgitter in x-, y- und z-Richtung; rechts: Schockbelastungskurve der mikromechanischen Beugungsgitter gemessen durch einen im Messaufbau integrierten Beschleunigungssensor. Die Schockbeaufschlagung entspricht der ISO-Norm.*

Norm-Anforderung für Schockbelastungen erfüllen. Darüber hinaus konnte die Grenze der maximalen Schockbelastbarkeit nicht bestimmt werden, da selbst die maximal mögliche Schockbelastung von $\pm 5000g$ keine Schädigungen zeigte. Um eine gesicherte statistische Bewertung vornehmen zu können, war die Anzahl der hergestellten mikromechanischen Beugungsgitter nicht ausreichend. Die vorgenommenen, punktuellen Messungen belegen aber die hohe Beständigkeit von einkristallinem Silizium [88] und damit auch die Belastbarkeit der Beugungsgitter gegenüber Schockeinwirkung. Dies ist insbesondere wichtig für den geplanten Einsatz im miniaturisierten NIR-Spektrometer, da auch hier der Spektrometerbetrieb bei Stößen und Schockeinwirkung gewährleistet werden muss.

7 Integration des mikromechanischen Beugungsgitters in das NIR-Spektrometer

In diesem Kapitel wird auf die Umsetzung des miniaturisierten NIR-Spektrometers basierend auf dem in dieser Arbeit entwickelten mikromechanischen Beugungsgitter eingegangen. Dabei liegt der Fokus auf der Analyse der Leistungsfähigkeit, die das miniaturisierte NIR-Spektrometer erreichen kann. Dies beinhaltet primär die spektrale Auflösung, die Abbildungsgenauigkeit, die spektrale Stabilität und das Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Die Leistungsfähigkeit ergibt sich sowohl aus den Eigenschaften des hergestellten mikromechanischen Beugungsgitters als auch aus der Wechselwirkung mit der Spektrometeroptik. Die Ergebnisse werden abschließend an den Anforderungen der Anwendungen als auch an vergleichbaren, dem Stand der Technik entsprechenden NIR-Spektrometern gespiegelt.

7.1 Aufbau des NIR-Mikrospektrometers

Aufbauend auf den in dieser Arbeit hergeleiteten theoretischen Zusammenhänge als auch basierend auf den gemessenen Eigenschaften der mikromechanischen Beugungsgitter, wurde in Kooperation mit Carinthian Tech Research (CTR) [89] das miniaturisierte NIR-Spektrometer konzipiert, dessen Abmessung auf $100 \times 80 \times 75 \text{ mm}^3$ beschränkt werden konnte und inzwischen über die Firma *Hiperscan* [90] vertrieben wird. Um den Aufbau so kompakt gestalten zu können, wurde das NIR-Spektrometer in drei Ebenen untergliedert. Die untere Ebene beinhaltet dabei

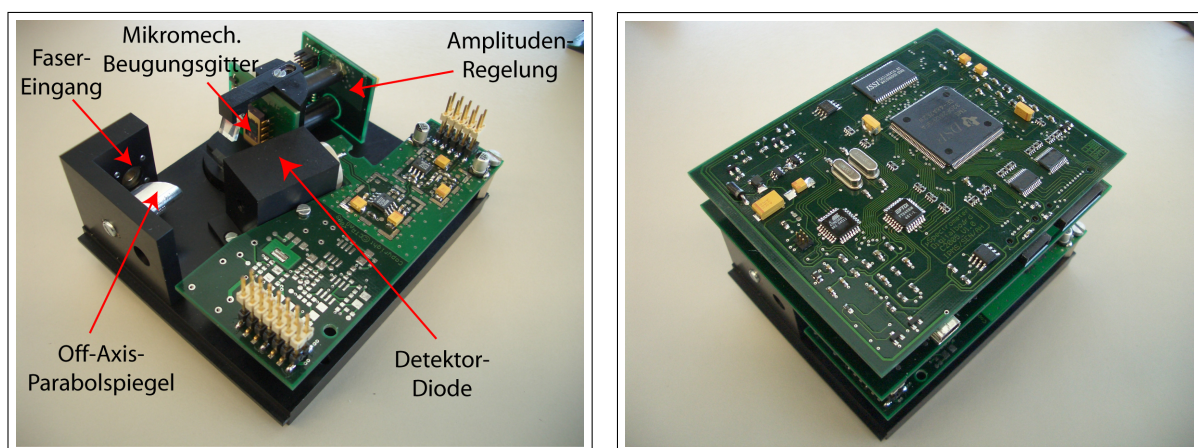


Abbildung 7.1: Technische Umsetzung des miniaturisierten NIR-Spektrometers in Kooperation mit Carinthian Tech Research (CTR) [89]; links: Aufbau der optischen Einheit; rechts: Gesamtaufbau ohne Gehäuse

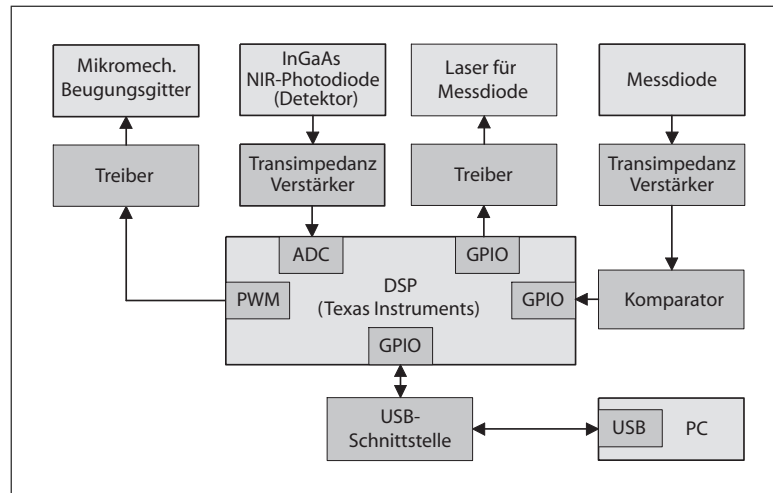


Abbildung 7.2: Elektrisches Blockschaltbild des miniaturisierten NIR-Spektrometers

den optischen Aufbau, der der Czerny-Turner-Konfiguration entspricht und somit auch das mikromechanische Beugungsgitter beinhaltet. Die mittlere Ebene besteht aus einer Platine, in der die benötigte Analog-Elektronik untergebracht ist. In der oberen Platine befindet sich äquivalent die benötigte Digital-Elektronik. Damit ist sowohl eine sinnvolle Trennung zwischen Analog- und Digital-Elektronik gewährleistet, um Störungen durch ein elektrisches Übersprechen zu verhindern, als auch ein definierter Bereich für die optischen Komponenten gegeben.

In Abb. 7.1 ist ein Bild der unteren, optischen Ebene im geöffneten NIR-Spektrometer dargestellt. Die Einkopplung des Lichts erfolgt über eine Lichtfaser mit der definierten numerischen Apertur von 0,22. Der parabolische Off-Axis-Spiegel kollimiert das eingestrahlte Licht und leitet es auf das mikromechanische Beugungsgitter weiter. Das unter einem festen Öffnungswinkel Θ gebeugte Licht von 15° gelangt über einen zweiten parabolischen Off-Axis-Spiegel auf die Detektordiode, die das Intensitätssignal zeitabhängig aufnimmt. Das mikromechanische Beugungsgitter ist auf einem drehbaren Sockel montiert, wodurch der mittlere Einfallswinkel α_0 und damit die Justage der mittleren detektierten Wellenlänge ermöglicht wird. Des Weiteren befinden sich oberhalb und unterhalb des Gitterspiegels zwei Umlenkspiegel. Sie leiten den Referenz-Laser-Strahl über die Gitterspiegelplatte, der von der Rückseite der Halterung eingekoppelt und auch dort über eine Detektordiode erfasst wird. Das erzeugte Signal wird zur Regelung der Schwingungsamplitude Ω_0 verwendet, wie bereits in Kap. 4.4 beschrieben.

Das zentrale Element der Spektrometerelektronik ist ein digitaler Signalprozessor (DSP), der alle Elemente steuert, die gemessenen Rohdaten verarbeitet und gleichzeitig auch die Berechnung des Spektrums übernimmt. Eine Skizze des elektrischen Layouts ist in Abb. 7.2 dargestellt. Der DSP steuert somit das mikromechanische Beugungsgitter, überwacht die Amplitudenregelung, verarbeitet die Intensitätssignale der Detektordiode zur Visualisierung des gemessenen Spektrums und bietet auch eine Daten-Schnittstelle nach außen (z. B. zu einem PC). Da die Einstellungen am DSP programmiert werden können, sind die meisten Anpassungen des miniaturisierten NIR-Spektrometers ohne hardwaretechnische Veränderungen durchführbar. Vor allem für die Kalibrierung des Geräts bietet diese Verfahrensweise große Vorteile.

7.2 Nachweis der Leistungsfähigkeit und spektrale Analyse

Um die Leistungsfähigkeit des entwickelten mikromechanischen Beugungsgitters im Einsatz des miniaturisierten NIR-Spektrometers abschließend bewerten zu können, sind die charakteristischen Parameter des Spektrometers zu untersuchen. Für diese Bestimmung wurde ein mikromechanisches Beugungsgitter mit einer Gitterkonstante von 1600 nm verwendet. Für eine Gitterkonstante von 2500 nm ist die Vorgehensweise identisch, daher wird in dieser Arbeit nicht näher auf diesen Aspekt eingegangen.

Zur Leistungsfähigkeit des Spektrometers gehört grundsätzlich die erreichbare spektrale Auflösung (s. Kap. 4.3), das Signal-zu-Rausch-Verhältnis und die Messdauer. Im besonderen Fall des hier entwickelten NIR-Spektrometers muss zusätzlich die Abbildungsgenauigkeit und die spektrale Stabilität überprüft werden. Beide Parameter sind direkt von der Bewegung des mikromechanischen Beugungsgitters abhängig, da das Spektrum in Abhängigkeit der zeitabhängigen Position der Gitterspiegelplatte berechnet wird (s. Gl. 4.51). Ergibt sich ein Unterschied zwischen realer und berechneter Position innerhalb einer Schwingungsperiode (s. Kap. 6.2.2), können die gemessenen spektralen Intensitäten nicht exakt den Wellenlängen zugeordnet werden. Die Folge ist eine reduzierte Abbildungsgenauigkeit des Spektrums. Entsteht die Abweichung im Vergleich zweier oder mehrerer aufeinanderfolgender Spektren, zeigt sich dies in einer geringeren spektralen Stabilität. Sie muss ausreichend hoch sein, um eine Mittelung der aufgenommenen Spektren zu ermöglichen, da diese Mittelung das Signal-zu-Rausch-Verhältnis der Messung verbessern kann.

Zur Bestimmung der spektralen Auflösung des NIR-Spektrometers wurde eine Referenz-Laser-Quelle verwendet, die an das Spektrometer angekoppelt wurde. Das emittierte Laserlicht besitzt eine definierte Wellenlänge von $1451,1\text{ nm}$ mit einer geringen Bandbreite von $0,2\text{ nm}$. Damit liegt die Bandbreite des Referenz-Lasers um den Faktor 38 unter dem theoretisch berechneten Bandpass des NIR-Spektrometers, der für die Wellenlänge λ von $1451,1\text{ nm}$ bzw. dem korrespondierenden Einfallswinkel α von $19,7^\circ$ bei $7,5\text{ nm}$ liegt (s. Abb. 4.9 links). Der Einfluss

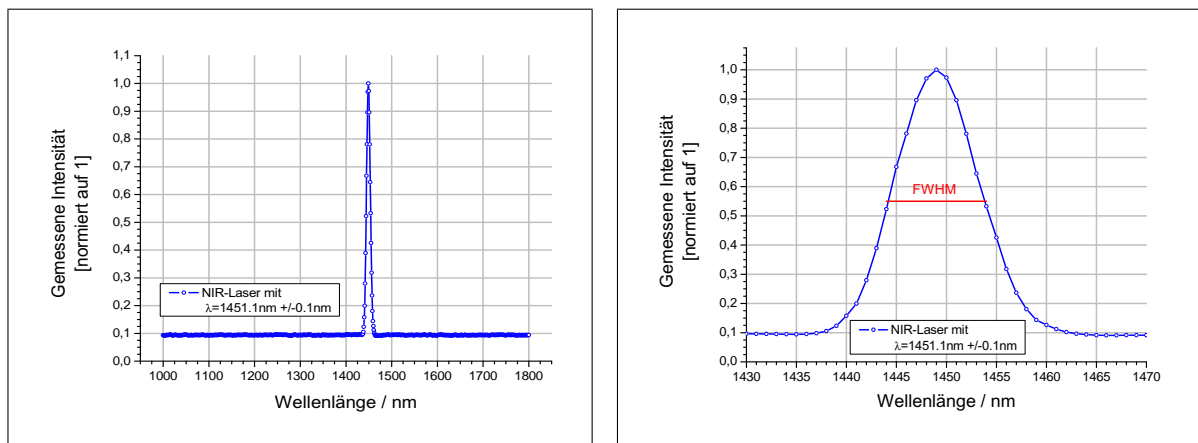


Abbildung 7.3: Spektrale Messung einer schmalbandigen Laserquelle ($\lambda = 1451,1\text{ nm}$, Bandbreite $0,2\text{ nm}$) zur Ermittlung der spektralen Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers; links: Gesamter Messbereich; rechts: Vergrößerter Bereich; Es ergibt sich eine spektrale Auflösung BP von $9,6\text{ nm}$ und erfüllt damit die festgelegten Zielspezifikationen.

der Bandbreite des Referenz-Lasers auf die spektrale Auflösung kann damit in guter Näherung vernachlässigt werden. Das gemessene Spektrum der Laser-Referenz ist in Abb. 7.3 *rechts* dargestellt. Die spektrale Auflösung des Spektrometers, die somit aus der Bandbreite (FWHM) des gemessenen Lasers resultiert, beträgt $9,6\text{ nm}$ und erfüllt damit die Zielspezifikation von 10 nm aus Tab. 2.4, die Voraussetzung ist, mit anderen NIR-Spektrometern konkurrieren zu können (vgl. Tab. 2.3).

Das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (SNR) des Spektrometers wurde ebenfalls aus der Laser-Referenzmessung bestimmt. Die maximale Intensität des Laser-Peaks wurde auf 1 normiert. Wie in Abb. 7.3 erkennbar, liegt der Mittelwert des Rauschlevels bei 0,094. Das SNR lässt sich folglich berechnen [91] mit

$$SNR = 10 \cdot \lg \left(\frac{I_{Signal}}{I_{Rauschen}} \right) \text{ dB} \quad (7.1)$$

und ergibt einen Wert von 10 dB . Parallel zum SNR ist auch die Standardabweichung des Rauschens zu betrachten. Sie definiert den Wert für die Änderung des SNR in Abhängigkeit der Wellenlänge und beschreibt gleichzeitig den Bereich des stochastischen Rauschlevels. Die Standardabweichung ergibt sich zu einem Wert von 0,00069, bzw. 31 dB bezogen auf das normierte Intensitäts-Signal des Referenz-Lasers. Weitergehende Untersuchungen des Spektrometer-Rauschens liegen außerhalb der Zielstellung dieser Arbeit, es wird allerdings angemerkt, dass weitere Optimierungsmöglichkeiten vor allem hinsichtlich der eingesetzten Detektordiode besteht.

Die Messzeit des miniaturisierten NIR-Spektrometers ist durch die Resonanzfrequenz des mikromechanischen Beugungsgitters vorgegeben, da in der ersten Halbschwingung die Messung und in der Zweiten die Berechnung des Spektrums erfolgt (vgl. Kap. 4.4). Bei gemessenen Frequenzen von 154 Hz (s. Kap. 6.2.1) ergibt sich damit eine Messzeit von $6,5\text{ ms}$. Im Vergleich zu anderen NIR-Spektrometern (vgl. Tab. 2.3), die im Minimum bei 1 ms bis 20 ms liegen, erreicht die Messzeit einen guten Wert. Sinnvollerweise kann dies genutzt werden, um durch Mittelung mehrerer aufeinanderfolgender Messungen das SNR des Spektrometers zu erhöhen.

Die Abbildungsgenauigkeit, wie auch die spektrale Stabilität des miniaturisierten NIR-Spektrometers wurde durch die Messung eines Referenz-Normals [92] bestimmt und von der Firma *Hiperscan* [90] zur Verfügung gestellt. Das Referenz-Normal besteht aus einer Kombination seltener Erden (Dy_2O_3 , Er_2O_3 , Ho_2O_3). Die Absorptionswellenlängen dieser Verbindungen sind mit hoher Genauigkeit bekannt ($< 1\text{ nm}$) und verteilen sich über den Spektralbereich von 800 nm bis 2000 nm .

Die Abbildungsgenauigkeit des Spektrometers wird ausschließlich durch die Berechnung des Spektrums (s. Gl. 4.51) bestimmt. Sie ist abhängig vom mittleren Einfallswinkel α_0 , der die Nulllage des mikromechanischen Beugungsgitters definiert, von der Schwingung der Gitterspiegelplatte $\Omega(t)$ (vgl. Kap. 6.2.2), von der Gitterkonstante g und dem Öffnungswinkel Θ . Dabei ist die Schwingung der einzig veränderliche Parameter während der Messung. Die Gitterkonstante g ist linear abhängig von der berechneten Wellenlänge $\lambda(t)$. Abweichungen zeigen sich somit in einer äquidistanten Stauchung bzw. Streckung des gemessenen Spektrums im Vergleich zur Referenz. Ungenauigkeiten der übrigen Parameter erzeugen wie in Gl. 4.51 zu sehen komplexere Abhängigkeiten, die sich auch gegenseitig beeinflussen. Aus diesem Grund ist es essenziell, die genannten

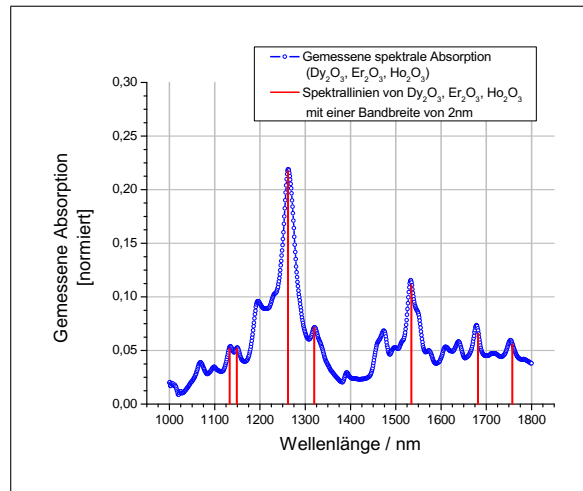


Abbildung 7.4: Nachweis der spektralen Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers mittels seltener Erden, die schmalbandige und definierte Absorptionswellenlängen besitzen

Parameter mit höchstmöglicher Genauigkeit zu bestimmen. Die Kalibration des Spektrometers erfolgt dann durch iterative Parameteranpassung im Vergleich des gemessenen Spektrums zum Referenz-Normal.

In Abb. 7.4 ist ein solches Spektrum dargestellt. Es ist deutlich erkennbar, dass die Aufnahme eines Spektrums mit dem in dieser Arbeit entwickelten mikromechanischen Beugungsgitter in hoher Genauigkeit möglich ist. Die zur Kalibration verwendeten Absorptionswellenlängen des Referenz-Normals sind als rote Balken eingezeichnet. In diesem Fall liegt die größte Abweichung zwischen Referenz (1681,4 nm) und Messung (1679 nm) bei einem Wert von 2 nm. Eine höhere Abbildungsgenauigkeit des Spektrometers ist grundsätzlich möglich, erfordert aber weiteren Kalibrierungsaufwand, der durch die Anwendung bestimmt werden sollte.

Die Wellenlängenstabilität des NIR-Spektrometers ist ausschließlich von der Schwingungsstabilität der Gitterspiegelplatte abhängig, da dies der einzig veränderliche Parameter ist. Um die Stabilität zu bestimmen, wurden zehn aufeinanderfolgende Spektren aufgenommen und ein festgelegter Absorptionspeak untersucht. Die wellenlängenabhängige Verschiebung des Peaks betrug dabei weniger als 1 nm und befindet sich somit innerhalb der festgelegten Zielspezifikationen von höchstens 1 nm (vgl. Tab. 2.4). Dies bedeutet gleichzeitig, dass die Messzeit mit der in Kap. 4.4 berechneten maximal erlaubten Messzeitabweichung von 2,11 μ s tatsächlich eingehalten wird (vgl. Tab. 4.4).

Im Ergebnis kann geschlussfolgert werden, dass die Leistungsfähigkeit des miniaturisierten NIR-Spektrometers konkurrenzfähig zu vergleichbaren, dem Stand der Technik entsprechenden NIR-Spektrometern ist, gleichzeitig aber kleiner bzw. günstiger hergestellt werden kann. Sämtliche festgelegten Zielspezifikationen aus Tab. 2.4 und somit die Entwicklungsziele dieser Arbeit konnten erfolgreich realisiert werden. Folglich ist nachgewiesen, dass die in dieser Arbeit hergeleiteten Grundlagen und die umgesetzten Eigenschaften des mikromechanischen Beugungsgitters die Anforderungen des Spektrometers vollständig erfüllen.

8 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Entwicklung und Charakterisierung von MEMS-basierten, mikromechanischen Beugungsgittern beschrieben, auf deren Grundlage ein neuartiges, miniaturisiertes NIR-Spektrometer realisiert werden konnte. Die Leistungsfähigkeit ist vergleichbar zu NIR-Spektrometern, die dem Stand der Technik entsprechen, zeichnet sich darüber hinaus aber durch einen robusten, kompakten Aufbau und einen deutlichen Kostenvorteil aus.

Erst der Einsatz des mikromechanischen Beugungsgitters ermöglicht dabei die Verwendung der Czerny-Turner-Konfiguration als Monochromator, wodurch ein kostenintensives Detektorarray durch einen Einzeldetektor ersetzt werden kann. Die Messung des Spektrums entspricht allerdings nun einem zeitaufgelösten Leistungssignal, dessen Signalverarbeitung unter Berücksichtigung der Wechselwirkung des mikromechanischen Beugungsgitters mit dem optischen Aufbau des NIR-Spektrometers entwickelt werden musste, aber erfolgreich umgesetzt werden konnte. Im Folgenden sind die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst.

a) Festlegung der Entwicklungsparameter

Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Anwendungsgebiete in der NIR-Spektroskopie, als auch im Vergleich zu NIR-Spektrometern, die dem Stand der Technik entsprechenden, konnten die für diese Arbeit entscheidenden Entwicklungsparameter abgeleitet werden. In einem Wellenlängenbereich von 900 nm - 2500 nm wurde eine spektrale Auflösung von 10 nm festgelegt mit einer spektralen Stabilität von 1 nm , die aufgrund der zeitabhängigen Messung beachtet werden muss. Für einen möglichst hohen Lichtdurchsatz wurde die untere Grenze der Beugungseffizienz für den gesamten Wellenlängenbereich auf mindestens 20% gesetzt.

b) Design und Dimensionierung

Basierend auf den Ergebnissen von a) wurde zunächst das mikromechanische Beugungsgitter hinsichtlich seiner Aktorik dimensioniert. Dabei wurde sowohl der Aufbau als auch die Funktionsweise der resonant schwingenden Gitterspiegelplatte beschrieben. Mit einer möglichst großen Kantenlänge von $3 \times 3\text{ mm}^2$ bei niedriger Resonanzfrequenz von 250 Hz und 150 Hz wurden Designparameter des mikromechanischen Beugungsgitters gefunden, die auch die maximale mechanische Belastbarkeit der siliziumbasierten Torsionsfedern erfüllen. Gleichzeitig konnte eine Optimierung hinsichtlich der maximalen Schwingungsamplitude und der benötigten Antriebsspannung erreicht werden. Für die maximale, durch das NIR-Spektrometer bereitgestellte Spannung von 36 V ergaben sich simulierte maximale Schwingungsamplituden von 12° bzw. 14° für mikromechanische Beugungsgitter mit Resonanzfrequenzen von 250 Hz bzw. 150 Hz . Die Bewegung der Gitterspiegelplatte lässt sich dabei in guter Näherung als sinusförmig beschreiben.

Basierend auf diesen Ergebnissen wurde das Beugungsgitter dimensioniert, dass in die Spiegelplatte integriert wird. Um Überlappungen der Beugungsordnungen zu verhindern, musste

der Wellenlängenbereich getrennt werden, in Bereiche von 900 nm - 1800 nm und 1250 nm - 2500 nm. Weitergehende Entwicklungen wurden insofern immer für beide Bereiche untersucht. Primär war das Rayleighkriterium einzuhalten, das eine minimale Linienanzahl von 180 bzw. 250 Linien auf der Gitterspiegelplatte fordert, um eine spektrale Auflösung von 10 nm grundsätzlich zu ermöglichen. Gleichzeitig wurde die Gitterkonstante auf die Schwingungsamplitude des mikromechanischen Beugungsgitters und die Winkeldispersion optimiert und somit Werte von 1600 nm bzw. 2500 nm bestimmt. Der hergeleitete Amplitudenbereich, in dem Messdaten aufgenommen werden, ergibt sich abhängig vom Wellenlängenbereich somit zu $\pm 9,0^\circ$ bzw. $\pm 7,8^\circ$.

Ferner konnte hergeleitet werden, dass bereits eine Abweichung von $\pm 4,4$ nm bzw. $\pm 5,0$ nm für eine Gitterkonstante von 1600 nm bzw. 2500 nm ausreicht, um die spektrale Auflösung von 10 nm durch auftretende Ghosts zu gefährden. Allerdings muss dabei zwischen lokal und periodisch auftretenden Abweichungen unterschieden werden, da Letztere durch geeignete Kalibration des NIR-Spektrometers behoben werden können.

Zur Dimensionierung des auf der Czerny-Turner-Konfiguration basierenden NIR-Spektrometers war der Einfluss des zu integrierenden mikromechanischen Beugungsgitters zu beachten. Um eine ideale Ausleuchtung der Gitterspiegelplatte zu gewährleisten, wurde eine Fokusslänge des am Eingang befindlichen Off-Axis Parabolspiegels P_1 von 5,9 mm bzw. 6,1 mm berechnet. Allerdings beeinflusst die Fokusslänge gleichzeitig die spektrale Auflösung des Spektrometers (Bandpass). Dies führt zu Werten von 13,4 nm bzw. 21 nm, die deutlich oberhalb von 10 nm liegen. Aus diesem Grund wurde die Fokusslänge L_A auf 10 mm erhöht. So konnte eine spektrale Auflösung (Bandpass) von 7,9 nm bzw. 9,9 nm erreicht werden. Die erhöhte Fokusslänge führt allerdings zu einer vergrößerten Ausleuchtung der Gitterspiegelplatte mit einem berechneten Durchmesser von 4,51 mm, wodurch eine Beleuchtung außerhalb der Gitterspiegelplatte hingenommen werden muss. Zukünftig liegt hier weiteres Optimierungspotenzial.

Zur Berechnung des gemessenen NIR-Spektrums war die Entwicklung einer geeigneten Signalverarbeitung maßgeblich. Um eine ausreichende Messauflösung zu sichern, wurden 3072 Datenpunkte pro Messung festgelegt, wodurch sich Wellenlängenintervalle von maximal 0,37 nm bzw. 0,47 nm ergaben. Des Weiteren konnte nachgewiesen werden, dass die Bestimmung und Regelung der Schwingungsamplitude des mikromechanischen Beugungsgitters ausreicht, um aus dem zeitaufgelösten Leistungssignal der Detektordiode das gemessene Spektrum berechnen zu können. Hierfür genügt eine zusätzliche Messdiode zur Amplitudenbestimmung, wobei die Regelung allein über die Anregungsfrequenz des mikromechanischen Beugungsgitters realisiert werden konnte. Somit konnte der von der Elektronik zu leistende Regelungsaufwand auf ein notwendiges Minimum reduziert werden.

Auf Basis der obigen Werte konnte die reale Messzeit eines Spektrums hergeleitet werden. Sie ergibt sich für mikromechanische Beugungsgitter mit einer Anregungsfrequenz von 150 Hz, einer gewählten Schwingungsamplitude von $\pm 10^\circ$ und einer Gitterkonstante von 1600 nm zu 2,4 ms, entsprechend für 2500 nm zu 1,91 ms. Der äquidistante, zeitliche Abstand zweier Messpunkte erreicht sogar Werte von 0,78 μ s bzw. 0,62 μ s. Zur Einhaltung der geforderten Wellenlängenstabilität von 1 nm zweier aufeinanderfolgender, berechneter Spektren ist somit nur eine maximale Abweichung des Messzeitpunktes von 2,11 μ s bzw. 1,32 μ s erlaubt. Dies sind enorme Anforderungen an die Regelung und Messung im miniaturisierten NIR-Spektrometer, die jedoch

erfolgreich realisiert werden konnten.

c) Technologieentwicklung mikromechanischer Beugungsgitter

Im Vergleich zu etablierten Herstellungsverfahren von Beugungsgittern wurde in dieser Arbeit ein Ansatz verfolgt, der auf einer anisotropen, nasschemischen Ätzung von einkristallinem Silizium basiert. Somit ist dies ein für die MEMS-Herstellung kompatibler Fertigungsprozess. Durch diesen Ansatz war es möglich, trapezförmige, sinusförmige und geblazte Gitterstrukturen mit hoher Formtreue, hoher Reproduzierbarkeit und mit äußerst glatten Oberflächen zu realisieren. Somit wurde die Grundlage für qualitativ hochwertige, optische Beugungsstrukturen geschaffen.

Alle in dieser Arbeit entwickelten Gitterstrukturen sind von den kristallografischen Eigenschaften des Siliziums abhängig. Hierbei wird ausgenutzt, dass $\{111\}$ -Kristallebenen mindestens zwei Größenordnungen langsamer ätzen als $\{100\}$ -Ebenen. Ohne zusätzlich eingebrachte Ätzstopp-schicht konnten somit Gitterstrukturen mit hoher Formtreue direkt in die Spiegelplatte eingebracht werden. Die erreichbare Beugungseffizienz der Gitterstrukturen ist maßgeblich von Ihrer Form und der Formtreue abhängig. Für alle in dieser Arbeit entwickelten Gitterstrukturen wurden intensive Effizienzsimulationen durchgeführt, wobei auch Abweichungen durch Streuungen im Herstellungsprozess abgebildet wurden. Dabei wurde neben der Maximierung der Beugungseffizienz auch die Minimierung von Effizienzsprüngen durch nicht mehr propagierende Beugungsordnungen verfolgt.

Aufbauend auf diesen Ergebnissen wurden Gitterstrukturen gefertigt und ihr Herstellungsverfahren im Detail beschrieben. Darüber hinaus konnten spezielle Kontrollstrukturen für den Fertigungsprozess entwickelt werden, die trotz einer hohen Auflösung von 40 nm im Mikroskop bewertbar sind. Dadurch konnte eine deutliche Vereinfachung und Beschleunigung der Prozessüberwachung mikromechanischer Beugungsgitter erreicht werden. Simulationen der Reflektivität der auf die Gitterstrukturen aufgetragenen Aluminiumschicht, sowie eine Beschreibung des gesamten Herstellungsprozesses für mikromechanische Beugungsgitter wurden im Detail erläutert.

d) Charakterisierung

Die gefertigten, mikromechanischen Beugungsgitter wurden intensiv hinsichtlich ihrer optischen und mechanischen Eigenschaften analysiert. Dies beinhaltete primär den Aufbau eines Messplatzes und die Evaluierung der erreichten Beugungseffizienz, des Weiteren auch Messungen zur Krümmung der Gitterspiegelplatte, der mikromechanischen Aktorik (Schwingungsamplitude, Antriebsspannung, Frequenz), Abweichung der realen resonanten Schwingung hinsichtlich des Einflusses auf die Spektrenberechnung, sowie Bestimmung der Stabilitätsspannung und der maximalen mechanischen Schockbelastung.

Die Simulationsergebnisse zur Beugungseffizienz wurden durch Messungen mit hoher Genauigkeit bestätigt. Ebenso gilt dies für die Werte der Schwingungsamplitude, Antriebsspannung und Frequenz. Gleichzeitig konnte nachgewiesen werden, dass sich die durch Schichtspannungen hervorgerufene Krümmung der Gitterspiegelplatte anisotrop ausbildet. So ist die Krümmung parallel zu den Gitterstrukturen geringer als orthogonal zu ihnen und liegt beispielsweise für trapezförmige Gitterstrukturen bei $0,38\text{ m}^{-1}$ bzw. $0,14\text{ m}^{-1}$. Ein signifikanter Einfluss auf die Optik des miniaturisierten NIR-Spektrometers konnte somit in guter Näherung ausgeschlossen werden.

Detaillierte Analysen des Schwingungsverhaltens des mikromechanischen Beugungsgitters zeigten maximale Abweichungen zu einer idealen Sinusschwingung von $0,19^\circ$ bei einer Schwingungsamplitude von $\pm 10^\circ$. Ursachen hierfür sind in der Reibung, vor allem durch das umgebende Fluid und in der, von der Schwingungsamplitude abhängige, elektrostatische bzw. mechanische Drehmoment zu suchen. Der hieraus abgeleitete Einfluss auf die Spektrenberechnung ist grundsätzlich von der Gitterkonstante abhängig. Berechnete Werte ergeben eine mögliche Abweichung im berechneten Spektrum von bis zu 15 nm , die durch eine geeignete Kalibration des miniaturisierten NIR-Spektrometers minimiert werden muss.

Messungen hinsichtlich der Stabilitätsspannung mikromechanischer Beugungsgitter zeigten, dass ein lateraler Krafteintrag in die Gitterspiegelplatte, der zu einer torkelnden Bewegung führen könnte, erst oberhalb von 63 V einsetzt. Da der Betrieb nur bis 36 V vorgesehen ist, ist dies als unkritisch anzusehen. Analysen zur maximalen mechanischen Schockbelastung wurden an mehreren mikromechanischen Beugungsgittern umgesetzt. Es konnte nachgewiesen werden, dass mechanische Schockbelastungen von $\pm 2000g$ in x-, y- und z-Richtung lediglich bei einem von 30 mikromechanischen Beugungsgittern zum Ausfall führte.

e) Nachweis der Leistungsfähigkeit des miniaturisierten NIR-Spektrometers

Die Konzeption eines kompakten Aufbaus des miniaturisierten NIR-Spektrometers wurde in Zusammenarbeit mit Carinthian Tech Research (CTR) [89] umgesetzt. So konnte das NIR-Spektrometer inklusive der benötigten Steuerungs- und Auswerteelektronik auf eine Abmessung von $100 \times 80 \times 75\text{ mm}^3$ beschränkt werden. Der Vertrieb wurde inzwischen von der Firma *HiperScan* [90] erfolgreich übernommen.

Um die Leistungsfähigkeit des miniaturisierten NIR-Spektrometers zu analysieren, wurden Messungen eines kalibrierten Lasers bei einer Wellenlänge von $1451,1\text{ nm}$ und bekannter spektraler Bandbreite von $0,2\text{ nm}$, sowie Referenzmessungen an seltenen Erden (Dy_2O_3 , Er_2O_3 , Ho_2O_3) im Wellenlängenbereich von 900 nm - 1800 nm durchgeführt und von der Firma *HiperScan* zur Verfügung gestellt. Hiermit konnte nachgewiesen werden, dass eine spektrale Auflösung des miniaturisierten NIR-Spektrometers von $7,5\text{ nm}$ bei $1451,1\text{ nm}$ erreicht werden konnte. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass das gemessene NIR-Spektrum maximal eine Abweichung von 2 nm gegenüber den bekannten Absorptionswellenlängen der seltenen Erden aufwies. Damit liegt die Abbildungsgenauigkeit des berechneten Spektrums deutlich unterhalb der spektralen Auflösung von 10 nm . Es sollte allerdings beachtet werden, dass dieser Wert nicht das absolut erreichbare Minimum abbildet. Des Weiteren konnte eine Wellenlängenstabilität von $< 1\text{ nm}$ bei zehn aufeinanderfolgenden gemessenen Spektren nachgewiesen werden.

Diese finalen Messungen zeigen, dass die Entwicklungsparameter, die aus den Anforderungen der Anwendungen und aus den dem Stand der Technik entsprechenden NIR-Spektrometern abgeleitet wurden, in vollem Umfang eingehalten werden konnten. Damit ist nachgewiesen, dass die in dieser Arbeit vorgestellten Entwicklungen von mikromechanischen Beugungsgittern zum Einsatz in miniaturisierten NIR-Spektrometern erfolgreich abgeschlossen werden konnten.

f) Ausblick

Die Entwicklung der in dieser Arbeit vorgestellten mikromechanischen Beugungsgitter zeigt,

welches Potenzial die Verwendung der MEMS-Technologie als Grundlage heutiger Messtechnik bietet. Gleichzeitig sind jedoch Optimierungen hinsichtlich der Weiterentwicklung sinnvoll. Diese betrifft beispielsweise die Fokusslänge des Parabolspiegels $P1$ im NIR-Spektrometer, die aufgrund der spektralen Auflösung von 10 nm auf 10 mm gesetzt wurde. Wie bereits beschrieben, resultiert hieraus eine zu große Ausleuchtung über die Gitterspiegelplatte hinaus, die zum Einen den Lichtdurchsatz im NIR-Spektrometer senkt, als auch das Streulicht erhöht. Ein Lösungsansatz würde hier eine vergrößerte und damit angepasste Gitterspiegelplatte bieten, allerdings erfordert dies Neuberechnungen hinsichtlich der Dimensionierung und des Designs des mikromechanischen Beugungsgitters.

Ein weiterer kritischer Parameter ist die Abweichung der Schwingung des mikromechanischen Beugungsgitters gegenüber einem idealen Sinusverlauf. Dieser Effekt ist nur sehr schwer über die Eigenschaften des Beugungsgitters zu beeinflussen, sinnvoller erscheint hier eine jeweils spezifische Kalibration der aufgebauten NIR-Spektrometer.

Grundsätzlich ist eine weitere Entwicklung der in dieser Arbeit vorgestellten mikromechanischen Beugungsgitter zu größeren Gitterspiegelplatten und niedrigeren Resonanzfrequenzen vorteilhaft. Eine gleichzeitige Erhöhung der Schwingungsamplitude würde eine Reduzierung der Gitterkonstante ermöglichen, wodurch bei unverändertem Wellenlängenbereich höhere Beugungseffizienzen erzielt werden könnten. Allerdings ist das erreichbare Optimierungspotenzial gegenüber dem notwendigen Aufwand in Design und Dimensionierung als gering einzuschätzen.

Literaturverzeichnis

- [1] Skrabal, P.: *Spektroskopie: Eine methodenübergreifende Darstellung vom UV- bis zum NMR-Bereich* UTB GmbH, 2009
- [2] *ISO 20473* ISO Standards 2007
- [3] Schrader, B. / Ozaki, Y. / Kawata, S.: *Infrared and Raman Spectroscopy - Methods and Applications* Wiley VCH Verlag GmbH 1995
- [4] Lakowicz, Joseph R.: *Principles of Fluorescence Spectroscopy* Springer, 2006
- [5] Burns, D. A. / Ciurczak, E. W.: *Handbook of Near-Infrared Analysis, 2. Edition* Marcel Dekker AG 2001
- [6] Siesler, H. W. / Ozaki, Y. / Kawata, S.: *Near-Infrared Spectroscopy* Wiley VCH Verlag GmbH 2002
- [7] Groh, W.: *Overtone absorption in macromolecules for polymer optical fibers* Macromol. Chem., Vol. 189, Issue 12, Seite 2861-2874, 1988
- [8] Feldhoff, R. / Huth-Fehre, T. / Cammann, K.: *Detection of inorganic wood preservatives on timber by near infrared spectroscopy* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 6, Seite A171-A173, 1998
- [9] N. Heigl et. al.: *Review: Near Infrared Spectroscopy for Polymer Research, Quality Control and Reaction Monitoring* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 15, Issue 5, Seite 269-282, 2007
- [10] Felizardo, P. et. al.: *Monitoring biodiesel fuel quality by near infrared spectroscopy* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 15, Issue 2, Seite 97-105, 2007
- [11] Xiaoli, C. et. al.: *In-line monitoring of several pilot scale catalytic reforming units using a short-wavelength near infrared analyser* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 13, Issue 1, Seite 37-46, 2005
- [12] Miller, C. E. / Svendsen, S. A. / Naes, T.: *Nondestructive Characterizations of Polyethylene/Nylon Laminates by Near-Infrared Spectroscopy* Appl. Spectrosc., Vol. 47, Issue 3, Seite 346-356, 1993
- [13] Beyers, C. P. et. al.: *In-Line Reaction Monitoring of a Methyl Methacrylate and N, N-Dimethylacrylamide Copolymerization reaction using Near-Infrared Spectroscopy* Appl. Spectrosc., Vol. 58, Issue 7, Seite 863-869, 2004
- [14] Ruckebusch, C. et. al.: *Quantitative analysis of Cotton-Polyester Textile Blends from Near-Infrared Spectra* Appl. Spectrosc., Vol. 60, Issue 5, Seite 539-544, 2006
- [15] Cassells, J. A. et. al.: *Near infrared spectroscopy studies of changes in stored grains* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 15, Issue 3, Seite 161-167, 2007
- [16] Engelhard, S. et. al.: *Quantifying Ethanol content in beer using interpretive Near-Infrared*

- Spectroscopy Appl. Spectrosc.*, Vol. 58, Issue 10, Seite 1205-1209, 2004
- [17] Walczak, B. / Massard, D. L.: *Multiple outlier detection revisited* Chemom. and Intell. Lab. Sys., Vol. 41, Issue 1, Seite 1-15, 1998
 - [18] M. Blanco, D. Valdes *Suppressing the Temperature Effect in Near Infrared Spectroscopy by using Orthogonal Signal Correction* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 14, Issue 3, Seite 155-160, 2006
 - [19] Van Huffel, S. / Vandewalle, J.: *The total least squares problem* SIAM 1991
 - [20] R. Marbach: *A new Method for Multivariate Calibration* J. Near Infrared Spectrosc., Vol. 13, Issue 5, Seite 241-254, 2005
 - [21] Manzardo, O.: *Micro-Sized Fourier Spectrometers* Université de Neuchâtel, Dissertation 2002
 - [22] Knipp D. et. al.: *Silicon-Based Micro-Fourier Spectrometer* IEEE Transaction on Electron Devices, Vol. 52, Issue 3, Seite 419-426, 2005
 - [23] Lammel, G. / Schweizer, S. / Renaud, Ph.: *Microspectrometer basd on a tunable optical filter of porous silicon* Sensors and Actuators A, Vol 92, Issue 1-3, Seite 52-59, 2001
 - [24] Loewen, Erwin G. / Popov, E.: *Diffraction gratings and applications* Marcel Dekker, Inc. 1997
 - [25] Hutley, M. C.: *Diffraction gratings* Seite 69ff, Academic Press 1982
 - [26] Adachi, S.: *Properties of Aluminum Gallium Arsenide* INSPEC 1993
 - [27] <http://sales.hamamatsu.com/en/products/solid-state-division/image-sensors/ccd.php>, 2011
 - [28] <http://sales.hamamatsu.com/en/products/solid-state-division/image-sensors/ingaas/ingaas.php>, 2011
 - [29] <http://www.oceanoptics.com/Products/nirquest.asp>, 2011
 - [30] [http://www.bayspec.com/userfiles/file/BaySpec-Datasheet - NIRS-0900-1700\(1\).pdf](http://www.bayspec.com/userfiles/file/BaySpec-Datasheet - NIRS-0900-1700(1).pdf), 2011
 - [31] [http://www.bayspec.com/userfiles/file/BaySpec-Datasheet - NIRS-DC-1250-2500\(2\).pdf](http://www.bayspec.com/userfiles/file/BaySpec-Datasheet - NIRS-DC-1250-2500(2).pdf), 2011
 - [32] Krippner, P.: *Hochempfindliche LIGA-Mikrospektrometersysteme für den Infrarotbereich* Karlsruher Institut für Technologie – Dissertation 1999
 - [33] Motamedi, M. E.: *MOEMS - micro-opto-electro-mechanical-systems* SPIE Press 2005
 - [34] <http://www.boehringer-ingelheim.de/auftragsproduktion/mikrosysteme/instrumentelle-analytik.html>, 2011
 - [35] Rowland, H.: *On concave gratings for optical purposes* Phil. Mag., Vol. 16, Issue 99, Seite 197-210, 1883
 - [36] Day, R. D. et. al.: *Diffractional-MEMS Implementation of a Hadamard Near-Infrared Spectrometer* IEEE Transducers, 13th Intern. Conference, 2005
 - [37] <http://www.analyticon-instruments.com>, 2011
 - [38] Wolffenbuttel, R. F.: *State-of-the-Art in Integrated Optical Microspectrometers* IEEE J.

- Trans. on Instr. and Meas., Vol. 53, Issue 1, Seite 197-202, 2004
- [39] Kong, S.-H. et. al.: *Spectral Performance of a Silicon IR Microspectrometer* IEEE Transducers, 12th Intern. Conference, 2003
 - [40] Gessner, T. et. al.: *Packaging and Characterization of Miniaturized Spectral Sensing Devices* SPIE Proc. MOEMS and Miniaturized Systems, Vol. 5346, Seite 134-140, 2004
 - [41] Gessner, T. et. al.: *Principle and Applications of a new MOEMS-Spectrometer* SPIE Proc. MOEMS Display, Imaging, and Miniaturized Systems, Vol. 6114, 611409, 2006
 - [42] Fastie, W. G.: *Image Forming Properties of the Ebert Monochromator* J. Opt. Soc. Am., Vol. 42, Issue 9, Seite 647-650, 1952
 - [43] Schuster, T.: *Demonstrationsmodell für ein Mikrospektrometer*, Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden (FH), Diplomarbeit 2002
 - [44] Hecht, E.: *Optik, 4.Edition* Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH 2005
 - [45] Hutley, M. C.: *Diffraction gratings* Academic Press 1982
 - [46] Palik, E. D.: *Handbook of Optical Constants of Solids* Academic Press 1998
 - [47] Winklmaier, Prof. Dr. D.: *Vorlesungsskript Instrumentelle Analytik* Hochschule für Angewandte Wissenschaften München, 2009
 - [48] Greivenkamp, J. E.: *Field Guide to Geometrical Optics* SPIE Field Guides, Volume FG01 2003
 - [49] Madou, Marc J.: *Fundamentals of Microfabrication* CRC Press 2002
 - [50] Menz, W. / Mohr, J. / Paul, O.: *Mikrosystemtechnik für Ingenieure, 3.Auflage* Wiley VCH Verlag GmbH 2005
 - [51] Horn, A.: *Modellierung und Simulation orientierungsabhängiger Ätzprozesse in Silizium* Technische Universität München, Dissertation 2005
 - [52] Schenk, H.: *Ein neuartiger Mikroaktor zur ein- und zweidimensionalen Ablenkung von Licht* Gerhard-Mercator-Universität-Gesamthochschule-Duisburg – Dissertation 2000
 - [53] Klose, T.: *Modellierung und Entwurf von resonanten Mikroaktoren mit elektrostatischem Antrieb* Interner Bericht Fraunhofer Institut für Photonische Mikrosysteme 2008
 - [54] Schenk, H.: *Siliziumbasierte mikrooptische Modulatoren* Brandenburgische Technische Universität Cottbus – Habilitation 2008
 - [55] Gross, D., Hauger W.: *Technische Mechanik, Band 2, Elastostatik* Springer Verlag, 10. Auflage, 2009
 - [56] Klose, T.: *Persönliche Mitteilung* Fraunhofer Institut für Photonische Mikrosysteme 2005
 - [57] Singh, S.: *Diffraction Gratings: Abberations and Applications* Optics and Laser Tech., Vol. 16, Seite 195-218, 1998
 - [58] Fleming, B. M. / Hutley, M. C.: *Blazed Diffractive Optics* App. Opt., Vol. 36, Issue 20, Seite 4635-4643, 1997
 - [59] Saito, T. T.: *Diamond Turning of Optics: The past, the present and the exciting future* App. Opt., Vol. 17, Issue 6, Seite 570-573, 1978

- [60] Blough, C. C. et. al.: *Single-point diamond turning and replication of visible and near-infrared diffractive optical elements* App. Opt., Vol. 36, Issue 20, Seite 4648-4654, 1997
- [61] Mashev, L. / Tonshev S.: *Formation of holographic diffraction gratings in photoresist* App. Phys. A26, Seite 143-149, 1981
- [62] Weiss, V. et. al.: *Materials for the recording of thin holographic grating couplers* Materials Science in Semicon. Proc., Vol. 3, Seite 413-418, 2000
- [63] Darbyshire, D. A. et al.: *Ion and plasma assisted etching of holographic gratings* Vacuum, Vol. 55, Seite 1-3, 1986
- [64] Aoyagi, Y. / Kuzuo, S. / Susumu S.: *High spectroscopic qualities in blazed ion-etched holographic gratings* Opt. Com., Vol. 29, Issue 3, Seite 253-255, 1979
- [65] Nelles, B. et. al.: *Design, Manufacturing and Testing of Gratings for Synchrotron Radiation* Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. A, Vol. 467-468, Seite 260-266, 2001
- [66] David, C. et. al.: *Diffractive grey-tone phase mask for laser ablation lithography* Microelectronic Engineering, Vol. 57-58, Seite 453-460, 2001
- [67] Naulleau, P. et. al.: *Fabrication of high-efficiency multilayer-coated binary blazed gratings in the EUV regime* Optics Communications, Vol. 200, Seite 27-34, 2001
- [68] Aubry, C. et. al.: *Polymer gratings achieved by focused ion beam* Synthetic Metals, Vol. 127, Seite 307-311, 2002
- [69] Fu, Y. et. al.: *Quasi-direct writing of diffractive structures with a focused ion beam* Optics Express, Vol. 12, Issue 9, Seite 1803-1809, 2004
- [70] Yu, W. et. al.: *Single-step fabrication of continuous surface relief micro-optical elements in hybrid sol-gel glass by laser direct writing* Optics Express, Vol. 10, Seite 443-448, 2002
- [71] David, C. et. al.: *Nano-structured anti-reflective surfaces replicated by hot embossing* Micro-electronic Engineering, Vol. 61-62, Seite 435-440, 2002
- [72] Leech, P. W. / Lee, R. A.: *Hot embossing of grating-based optically variable images in thermoplastic acrylic lacquer* J. Mat. Science, Vol. 42, Seite 4428-4434, 2007
- [73] Yang, L.-J. et. al.: *The binary deposition method using standard CMOS structural layers to fabricate optical gratings and microlenses* SPIE Proc. Terahertz and Gigahertz Photonics, Vol. 3795, Seite 605-610, 1999
- [74] Yu, Z. et. al.: *Fabrication of nanoscale gratings with reduced line edge roughness using nanoimprint lithography* J. Vac. Sci. Technol. B, Vol. 21, Issue 5, Seite 2089-2092, 2003
- [75] Xie, S. et. al.: *A nanoimprint lithography for fabricating SU-8 gratings for near-infrared to deep-UV application* Microelectronic Engineering, Vol. 85, Seite 914-917, 2008
- [76] <http://www.canyonmaterials.com>, 2011
- [77] Gao, F. et. al.: *One-step lithography for fabrication of multifunction diffractive structures with grey-tone mask* Microelectronic Engineering, Vol. 61-62, Seite 165-171, 2002
- [78] <http://www.pcgrate.com>, International Intellectual Group IIG, 2011
- [79] French, P. J. / Wolffenbuttel, R. F.: *Low-temperature BPSG reflow compatible with surface micromachining* J. of Micromech. MicroEng., Vol. 5, Seite 125-127, 1996

- [80] Levy, R. A. / Nassau, K.: *Reflow Mechanisms of Contact Vias in VLSI Processing* J Electrochem. Soc., Vol. 133, Issue 7, Seite 1417-1424, 1986
- [81] Osserman, R.: *The Isoperimetric Inequality* Bulletin of the American Math. Soc., Vol. 84, Nr. 6, Seite 1183-1238, 1978
- [82] Rangelow, I. W.: *Critical tasks in high aspect ratio silicon dry etching for microelectromechanical systems* IEEE J. of Vac. Science and Techn. A, Vol. 21, Issue 4, Seite 1550-1562, 2003
- [83] Ohara, J. et al: *Improvement of high aspect ratio Si etching by optimized oxygen plasma irradiation inserted DRIE* J. of Micromech. Microeng., Vol. 19, Number 6, 2009
- [84] Kunath, C.: *Persönliche Mitteilung* Fraunhofer Institut für Photonische Mikrosysteme 2008
- [85] Hodge, T. C. et al: *Stresses in Thin Film Metallization* IEEE Trans. on Comp. and Pack. Tec. A, Vol. 20, Nr. 2, Seite 241-250, 1997
- [86] <http://www.veeco.com>, Veeco Wyko NT-8000 Optical Profiler, 2011
- [87] Bartels, R. H. / Beatty, J. C. / Barsky, B. A.: *An introduction to splines for use in computer graphics and geometric modelling* Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, 1987
- [88] Srikar, V. T. / Senturia, S. D.: *The Reliability of Microelectromechanical Systems (MEMS) in Shock Environments* JMEMS, Vol. 11, Issue 3, Seite 206-214, 2002
- [89] <http://www.ctr.at>, 2011
- [90] <http://www.hiperscan.de>, 2011
- [91] <http://de.wikipedia.org/wiki/Signal-Rausch-Verhältnis>, 2011
- [92] Near Infrared Reflectance Wavelength Standard, Standard Reference Material 1920a, National Institute of Standards and Technology

9 Anhang

9.1 Absorptionsbanden im NIR-Bereich

Tabelle 9.1: *NIR-Absorptionsbanden ausgewählter Moleküle [6]*

Schwingungsmode	Wellenlänge / nm	Schwingungsmode	Wellenlänge / nm
$-CH_3$			
Kombinatorisch	1010 - 1020	1. Oberschwingung	1710 - 1730
	1355 - 1365		1770 - 1785
	2275 - 2285		
2. Oberschwingung	1150 - 1165	3. Oberschwingung	870 - 885
	1190 - 1200		900 - 910
$-CH$			
Kombinatorisch	1070 - 1085	1. Oberschwingung	1680 - 1690
	1410 - 1420		
	1440 - 1450		
2. Oberschwingung	1130 - 1140	3. Oberschwingung	850 - 860
$-OH$			
Kombinatorisch	2060 - 2090	1. Oberschwingung	1680 - 1690
2. Oberschwingung	940 - 955		
	2370 - 2390		
$-NH_2$			
Kombinatorisch	1970 - 2010	1. Oberschwingung	1450 - 1480
			1500 - 1520
			1520 - 1540
2. Oberschwingung	980 - 1020	3. Oberschwingung	770 - 790
	1000 - 1020		780 - 800
	1020 - 1040		800 - 820
	⋮	⋮	⋮

9.2 Herleitung der Beugungsbedingung für die Czerny-Turner-Konfiguration

Die allgemeine Beugungsbedingung eines Reflexionsgitters ist definiert durch

$$n \cdot \lambda = g \cdot (\sin \alpha + \sin \beta) \quad (9.1)$$

mit n der Beugungsordnung, λ der Wellenlänge, g der Gitterkonstante und den Einfalls- bzw. Ausfallswinkeln α , β . Im Spezialfall der Czerny-Turner-Konfiguration ist der Öffnungswinkel Θ zwischen Einfalls- und Ausfallswinkel der zur Messung verwendeten Beugungsordnung n_B jederzeit konstant. Es gilt

$$\Theta = \beta - \alpha \quad (9.2)$$

Durch Einsetzen von Gl. 9.2 in Gl. 9.1 erhält man folglich

$$n_B \cdot \lambda = g \cdot (\sin \alpha + \sin (\Theta + \alpha)) \quad (9.3)$$

Für Sinus- und Kosinusfunktionen gelten die Additionstheoreme, weshalb allgemein gilt

$$\sin x + \sin y = 2 \sin \left(\frac{x + y}{2} \right) \cos \left(\frac{x - y}{2} \right) \quad (9.4)$$

Angewendet auf Gl. 9.3 und aufgelöst nach der gesuchten Wellenlänge λ ergibt sich somit die spezielle Beugungsbedingung für die Czerny-Turner-Konfiguration mit

$$\lambda = \frac{2g \cdot \sin \left(\frac{\Theta}{2} + \alpha \right) \cdot \cos \left(\frac{\Theta}{2} \right)}{n_B} \quad (9.5)$$

9.3 Intensitätsverteilung am Beispiel eines Doppelspalts

Die Intensitätsverteilung ergibt sich aus einer Faltung des Anteils des periodischen Gitters und der Beugungsintensität einer Gitterlinie. Daraus ergibt sich die Gesamtintensität zu:

$$I = I_0 \cdot \frac{\sin^2 \delta}{\delta^2} \cdot \frac{\sin^2 N\gamma}{\sin^2 \gamma} \quad \left(\text{mit } \gamma = \frac{\pi g(\sin \theta)}{\lambda} \quad \text{und} \quad \delta = \frac{\pi d(\sin \theta)}{\lambda} \right) \quad (9.6)$$

Die Einflüsse der Faktoren sind in Abb. 9.1 als Beispiel für ein Gitter mit zwei Gitterlinien (Doppelspalt) verdeutlicht.

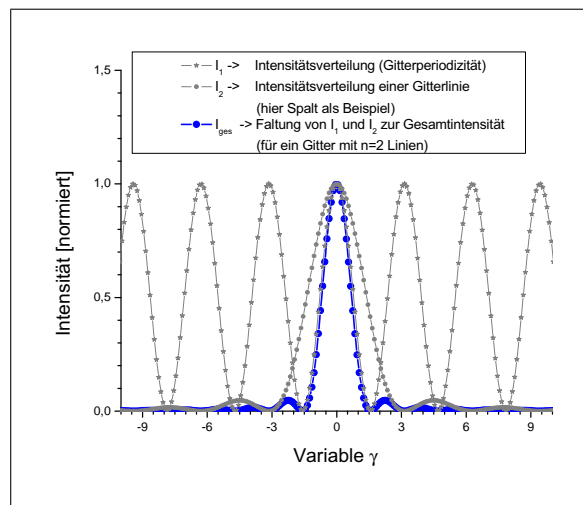


Abbildung 9.1: Winkelabhängige Intensitätsverteilung am Beispiel eines homogen ausgeleuchteten Doppelspalts

9.4 Herleitung der Fokusslänge für parabolische Off-Axis-Spiegel

Die reflektierende Oberfläche eines Off-Axis-Parabolspiegels kann allgemein beschrieben werden durch

$$y = px^2 + q \tag{9.7}$$

Dabei wurde die Lichtquelle in erster Näherung als Punktquelle definiert, die sich im Ursprung des Koordinatensystems befindet. Die Steigung der parabolischen Kurve berechnet sich durch die Ableitung der Funktion zu

$$\frac{\delta y}{\delta x} = 2px = \tan(\eta) \quad (9.8)$$

Dabei kann der Steigungswinkel η in jedem Punkt der Kurve durch den Ausstrahlwinkel Ψ und den Fokuswinkel ϕ beschrieben werden (s. Abb. 9.2)

$$\eta = \frac{\phi + \Psi}{2} \quad (9.9)$$

Im Schnittpunkt der parabolischen Kurve mit der x-Achse sind die Werte x_2 bzw. y_2 gegeben. Hieraus können die Konstanten p und q von Gl. 9.8 berechnet werden zu

$$2px_2 = \tan\left(\frac{\phi + \Psi}{2}\right) = \tan\left(\frac{90^\circ + 0^\circ}{2}\right) = 1 \quad (9.10)$$

$$p = \frac{1}{2x_2} \quad bzw. \quad x_2 = \frac{1}{2p} \quad (9.11)$$

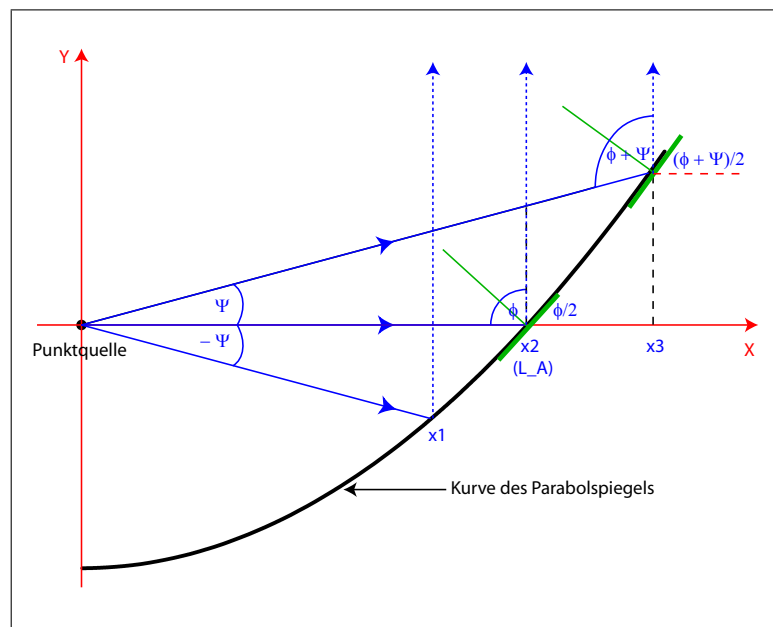


Abbildung 9.2: *Prinzipskizze eines Off-Axis-Parabolspiegels zur Herleitung der Dimensionierung*

$$y_2 = 0 = px_2^2 + q = \frac{1}{2x_2}x_2^2 + q \quad (9.12)$$

$$q = -\frac{1}{2x_2}x_2^2 = -\frac{x_2}{2} = -\frac{1}{4p} \quad (9.13)$$

Die parabolische Gleichung ergibt sich in Abhängigkeit von x_2 dann zu

$$y = \frac{1}{2x_2}x^2 - \frac{x_2}{2} \quad (9.14)$$

x_2 entspricht dabei genau der Fokusslänge L_A . Der Durchmesser d_p des durch den Parabolspiegel kollimierten Lichts lässt sich bestimmen, indem die Schnittpunkte $(x_1|y_1)$ bzw. $(x_3|y_3)$ der äußersten Lichtstrahlen mit der parabolischen Kurve verwendet werden. Eingesetzt in die Ableitung (s. Gl. 9.8) ergibt sich dann

$$2px_1 = \tan\left(\frac{\phi + \Psi}{2}\right) \quad (9.15)$$

$$x_1 = x_2 \cdot \tan\left(\frac{\phi - |\Psi|}{2}\right) \quad (9.16)$$

bzw.

$$x_3 = x_2 \cdot \tan\left(\frac{\phi + |\Psi|}{2}\right) \quad (9.17)$$

Der Durchmesser d_p des kollimierten Lichtstrahls ergibt sich genau aus der Differenz von x_3 und x_1 . Man erhält die endgültige Formel für die benötigte Fokusslänge L_A mit

$$d_p = x_3 - x_1 = x_2 \cdot \left(\tan\left(\frac{\phi + |\Psi|}{2}\right) - \tan\left(\frac{\phi - |\Psi|}{2}\right) \right) \quad (9.18)$$

bzw.

$$L_A = x_2 = \frac{d_p}{\left(\tan\left(\frac{\phi + |\Psi|}{2}\right) - \tan\left(\frac{\phi - |\Psi|}{2}\right) \right)} \quad (9.19)$$

9.5 Herleitung der Amplitudenberechnung des mikromechanischen Beugungsgitters

Zur Messung der Amplitude des mikromechanischen Beugungsgitters werden eine Laserdiode und zwei Messdioden verwendet (vgl. Abb. 6.9). Sie liegen alle in der Schwingungsebene der Gitterspiegelplatte. Im unausgelenkten Zustand wird das mikromechanische Beugungsgitter so ausgerichtet, dass der reflektierte Laserstrahl genau die erste Messdiode D_0 trifft. Die allgemeine Schwingungsgleichung der Gitterspiegelplatte ergibt sich unter der Annahme einer idealen Sinusschwingung zu

$$\Omega(t) = \Omega_0 (\sin(2\pi f_{mB} \cdot t)) \quad (9.20)$$

Da die Winkel der Messdioden D_0 und D_1 durch den Messaufbau mit σ und ϵ festgelegt sind, können sie in Abhängigkeit zur Gitternormalen im unausgelenkten Zustand ($t = 0$) berechnet werden mit

$$\sigma = \arctan\left(\frac{z_1}{l}\right) \quad (9.21)$$

bzw.

$$\epsilon = \arctan\left(\frac{z_2}{l}\right) \quad (9.22)$$

Schwingt die Gitterspiegelplatte, ergibt sich ein Zeitpunkt Δt bei der zweiten Messdiode D_1 durch den Laserstrahl getroffen wird. Der Winkel zur unausgelenkten Gitternormalen beträgt in diesem Fall $\epsilon - \sigma$. Die Gitterspiegelplatte ist aufgrund der Reflexionsbedingungen des Laserstrahls aber nur um $(\epsilon - \sigma)/2$ ausgelenkt. Die Zeitspanne Δt ergibt sich genau aus der Differenz der Messzeitpunkte der beiden Messdioden ($t(D_1) - t(D_0)$). Setzt man diese Werte nun in Gl. 9.20 ein, erhält man aus

$$\Omega(\Delta t) = \Omega_0 [\sin[2\pi f_{mB} \cdot (t(D_1) - t(D_0))]] \quad (9.23)$$

bzw.

$$\frac{1}{2}(\epsilon - \sigma) = \Omega_0 [\sin[2\pi f_{mB} \cdot (t(D_1) - t(D_0))]] \quad (9.24)$$

folglich

$$\frac{1}{2} \left(\arctan\left(\frac{z_2}{l}\right) - \arctan\left(\frac{z_1}{l}\right) \right) = \Omega_0 [\sin[2\pi f_{mB} \cdot (t(D_1) - t(D_0))]] \quad (9.25)$$

und abschließend die Berechnung der Schwingungsamplitude zu

$$\Omega_0 = \frac{\frac{1}{2} \left(\arctan\left(\frac{z_2}{l}\right) - \arctan\left(\frac{z_1}{l}\right) \right)}{\sin[2\pi f_{mB} \cdot (t(D_1) - t(D_0))]} \quad (9.26)$$